

S/N unknown

#3 Priority Paper
A. Brunner
PATENT 6/29/01

IN THE UNITED STATES PATENT AND TRADEMARK OFFICE

Applicant: Katsue KAOSHI Serial No.: unknown
Filed: concurrent herewith Docket No.: 13041.8US01
Title: METHOD OF SPECTRUM ANALYSIS IN TWO-DIMENSIONAL
REPRESENTATION

CERTIFICATE UNDER 37 CFR 1.10

'Express Mail' mailing label number: EL650064813US

Date of Deposit: 13 February 2001

I hereby certify that this correspondence is being deposited with the United States Postal Service 'Express Mail Post Office To Addressee' service under 37 CFR 1.10 on the date indicated above and is addressed to the Assistant Commissioner for Patents, Washington, D.C. 20231.

By: 
Name: Brian Maharaj

jc868 U.S. PTO
09/782440
02/13/01

SUBMISSION OF PRIORITY DOCUMENT(S)

Assistant Commissioner for Patents
Washington, D.C. 20231


Dear Sir:

The Applicant encloses herewith two certified copies of Japanese applications, Serial No. 2000-083319 and 2000-332077, filed 24 March 2000 and 31 October 2000, respectively, the right of priority of which is claimed under 35 U.S.C. § 119.

Respectfully submitted,

MERCHANT & GOULD P.C.
P.O. Box 2903
Minneapolis, Minnesota 55402-0903
(612) 332-5300

Dated: 13 February 2001

By: 
Douglas P. Mueller
Reg. No. 30,300

DPM/klj

日本国特許庁
PATENT OFFICE
JAPANESE GOVERNMENT

井 3
Jc868 U.S. PTO
09/782440
02/13/01

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されている事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed with this Office.

出願年月日
Date of Application: 2000年 3月24日

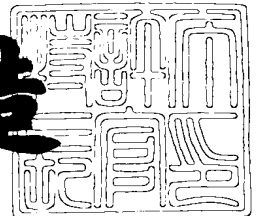
出願番号
Application Number: 特願2000-083319

出願人
Applicant(s): 小足 克衛

2001年 1月26日

特許庁長官
Commissioner,
Patent Office

及川耕造



出証番号 出証特2001-3001603

【書類名】 特許願

【整理番号】 P0355KK01

【提出日】 平成12年 3月24日

【あて先】 特許庁長官 殿

【発明者】

 【住所又は居所】 大阪府豊中市新千里東町2丁目7番C25-103号

 【氏名】 小足 克衛

【特許出願人】

 【住所又は居所】 大阪府豊中市新千里東町2丁目7番C25-103号

 【氏名又は名称】 小足 克衛

【代理人】

 【識別番号】 100104581

 【弁理士】

 【氏名又は名称】 宮崎 伊章

【手数料の表示】

 【予納台帳番号】 049456

 【納付金額】 21,000円

【提出物件の目録】

 【物件名】 明細書 1

 【物件名】 要約書 1

 【物件名】 図面 1

【プルーフの要否】 要

【書類名】 明細書

【発明の名称】 2次元表現によるスペクトル処理方法

【特許請求の範囲】

【請求項1】 所定の分析対象物について、分析器の出力信号強度が、その時間、波数又は波長の関数として表されたスペクトルデータを準備し、 n を0以上の整数とし、 m を n とは異なる0以上の整数とした場合において、上記スペクトルデータについて、そのスペクトルプロファイル上の複数のデータ点についてそれぞれ、上記出力信号強度の、時間、波数又は波長に対する n 次微分値及び m 次微分値を演算し、 X - Y 座標系としての2次元座標面における X 座標が上記 n 次微分値であり、 Y 座標が上記 m 次微分値である点を上記2次元座標面上にプロットして、上記スペクトルデータについての微分スペクトル2次元プロファイルを作成し、上記微分スペクトル2次元プロファイルに基づいて、上記スペクトルデータに関する所定の特徴情報を得る2次元表現によるスペクトルデータの処理方法であって、

上記特徴情報に基づいて、分析対象物のスペクトルプロファイルに含まれている成分バンドのうち、少なくとも1つの成分バンドに関するバンドパラメータを推定して、少なくとも1つの成分バンドを推定し、

分析対象物のスペクトルプロファイル又は微分スペクトル2次元プロファイルから、すでに推定された特定の1つ又は複数の成分バンドのプロファイル又は微分スペクトル2次元プロファイルを除くことで特定の成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイルを得て、この特定の成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイルに基づいて所定の特徴情報を得て、当該特徴情報に基づいて他の成分バンドに関するバンドパラメータを推定して、他の成分バンドを少なくとも1つ推定することを繰り返して順次成分バンドを推定することにより、

分析対象物のスペクトルプロファイルを構成する成分バンドを推定する2次元表現によるスペクトルデータの処理方法。

【請求項2】 成分バンドが、ガウス分布、ローレンツ分布又はこれらの混合型の分布のシングルバンドである請求項1記載の2次元表現によるスペクトル処理方法。

【請求項 3】 n が 1 及び／又は 3 であり、 m が $n + 1$ である請求項 1 又は 2 記載の 2 次元表現によるスペクトルの処理方法。

【請求項 4】 X 座標を 1 次微分値とし、 Y 座標を 2 次微分値とした微分スペクトル 2 次元プロファイルにおいて、当該微分スペクトル 2 次元プロファイルの極小点と、当該極小点から時間、波数又は波長が増加又は減少した方向における最近点の X 軸との交点を求め、前記極小点の時間、波数又は波長を X_{C1} とし、前記 X 軸との交点の時間、波数又は波長を X_{P1} とした場合において、成分バンドのバンド幅の近似値 W_{a1} を下記式 (4) により求める請求項 2 又は 3 記載の 2 次元表現によるスペクトルの処理方法。

【数 1】

$$W_{a1} = (1/A) |X_{C1} - X_{P1}| \quad (4)$$

(式中、 W_{a1} はガウス分布又はローレンツ分布のシングルバンドにおけるバンド幅の近似値である。 A は、シングルバンドがガウス分布の場合 0.42466 であり、ローレンツ分布の場合 0.288675 である。)

【請求項 5】 X 座標を 3 次微分値とし、 Y 座標を 4 次微分値とした微分スペクトル 2 次元プロファイルにおいて、当該微分スペクトル 2 次元プロファイルの極小点と、当該極大点から時間、波数又は波長が増加又は減少した方向における最近点の X 軸との交点を求め、前記極大点の時間、波数又は波長を X_{C3} とし、前記 X 軸との交点の時間、波数又は波長を X_{Q1} とした場合において、成分バンドのバンド幅の近似値 W_{a3} を下記式 (5) により求める請求項 2 乃至 4 のいずれかの項に記載の 2 次元表現によるスペクトルの処理方法。

【数 2】

$$W_{a3} = (1/B) |X_{C3} - X_{Q1}| \quad (5)$$

(式中、 W_{a3} はガウス分布又はローレンツ分布のシングルバンドにおけるバンド幅の近似値である。 B は、シングルバンドがガウス分布の場合 0.31508

であり、ローレンツ分布の場合 0.16426 である。)

【請求項 6】 すでに推定された特定の複数の成分バンドのうち、隣り合った成分バンドをグループ化し、

分析対象物のスペクトルプロファイル又は微分スペクトル 2 次元プロファイルから、前記グループ化された以外の推定された全成分バンドのプロファイル又は微分スペクトル 2 次元プロファイルを除くしてグループ化成分バンド以外除去微分スペクトル 2 次元プロファイルを得て、

前記グループ化された全成分バンドに関する微分スペクトル 2 次元プロファイルと、前記グループ化成分バンド以外除去微分スペクトル 2 次元プロファイルとが一致するように、必要に応じて新たな成分バンドを追加しつつ、グループ化された成分バンドに関する各成分バンド及び／又は追加成分バンドに関するバンドパラメータを調整して、グループ化された成分バンドに関する各成分バンド及び／又は追加成分バンドのバンドパラメータを推定することを繰り返して、

分析対象物のスペクトルプロファイルを構成する成分バンドを推定する請求項 1 乃至 5 のいずれかの項に記載の 2 次元表現によるスペクトルデータの処理方法

【請求項 7】 スペクトルデータが、赤外スペクトル、可視スペクトル、紫外スペクトル、電子線スペクトル、X 線スペクトル、 γ 線スペクトルまたはマイクロ波スペクトルによるデータである請求項 1 乃至 6 のいずれかの項に記載の 2 次元表現によるスペクトルの処理方法。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は、分光分析における分析対象物のスペクトルデータの処理に微分演算を利用して、該分析対象物について正確な特徴情報を得るようにした 2 次元表現によるスペクトルデータの処理方法に関する。

【0002】

【従来技術】

従来、一般に、分光分析（例えば、赤外線吸収スペクトル分析等）では、分析

の対象となっている物質（以下、「分析対象物」と称する場合がある）を透過した光の強度スペクトル（透過度スペクトル）又は吸収された光の強度スペクトル（吸光度スペクトル）を測定し、該スペクトルの形態すなわちスペクトルプロファイルに基づいて分析対象物に関する種々の自然科学的な特徴ないしは情報（以下、「特徴情報」と称する場合がある）、例えば該分析対象物に含まれる物質の種類あるいは濃度等を得ている。このようなスペクトルプロファイルとしては、従来、分析対象物の透過光の吸光度（あるいは強度）を、波数（あるいは波長）に対して表したスペクトルプロファイル（以下、「吸光度・波数スペクトルプロファイル」と称する場合がある）が広く用いられている。このようなスペクトルプロファイルは多数の成分バンドが重畳して形成されていると考えることができる。

【0003】

このようなスペクトルプロファイルのデータの処理方法として、例えば、特開平11-148865号公報では、分光分析における分析対象物のスペクトルデータの処理に微分演算を利用する処理方法が開示されている。具体的には、所定の分析対象物について、分析器の出力信号強度が、その時間、波数又は波長の関数としてあらわされたスペクトルデータを準備し、 $n1$ を0以上の整数とし、 $n2$ を $n1$ とは異なる0以上の整数とした場合において、上記スペクトルデータについて、そのスペクトルプロファイル上の複数のデータ点についてそれぞれ、上記出力信号強度の、時間、波数又は波長に対する $n1$ 次微分値及び $n2$ 次微分値を演算し、2次元座標面における x 座標が上記 $n1$ 次微分値であり、 y 座標が上記 $n2$ 次微分値である点を上記2次元座標面上にプロットして、上記スペクトルデータについての微分スペクトル2次元プロファイルを作成し、上記微分スペクトル2次元プロファイルに基づいて、上記スペクトルデータに関する所定の特徴情報を得ることを特徴とする2次元表現によるスペクトルデータの処理方法が開示されている。

【0004】

【発明が解決しようとする課題】

しかしながら、特開平11-148865号公報に記載の処理方法では、分析

対象物のスペクトルプロファイルに含まれる成分バンドが1つ（単数）である場合はその成分バンドを導くことができるが、分析対象物のスペクトルプロファイルが複数の成分バンドを含有し、それらの成分バンドが重畳している場合は、その複数の成分バンドをすべて導くことは困難であり、推定することさえも極めて困難である。特に、分析対象物のスペクトルプロファイルは、重畳した複数の成分バンドを有している場合が多い。そのため、特開平11-148865号公報に記載の方法では、複数の成分バンドを含有しているスペクトルプロファイルを有する分析対象物については、その成分バンドのうち主要な成分バンドはある程度推定することができるが、主要でない成分バンド、すなわち、構成への寄与が少ない成分バンドや、重畳して個々の特徴が明確に現れていない成分バンドについては、推定することさえも極めて難しい。

【0005】

従って、本発明の目的は、複数の成分バンドを含有しているスペクトルプロファイルを有する分析対象物について、その複数の成分バンドを容易に推定することができるスペクトルデータの処理方法を提供することにある。

【0006】

【課題を解決するための手段】

本発明では、特開平11-148865号公報に記載の方法を基にして、さらなる改良を試み、鋭意検討の結果、所定の分析対象物について、分析器の出力信号強度が、その時間、波数又は波長の関数として表されたスペクトルデータを準備し、 n を0以上の整数とし、 m を n とは異なる0以上の整数とした場合において、上記スペクトルデータについて、そのスペクトルプロファイル上の複数のデータ点についてそれぞれ、上記出力信号強度の、時間、波数又は波長に対する n 次微分値及び m 次微分値を演算し、 X - Y 座標系としての2次元座標面における X 座標が上記 n 次微分値であり、 Y 座標が上記 m 次微分値である点を上記2次元座標面上にプロットして、上記スペクトルデータについての微分スペクトル2次元プロファイルを作成し、上記微分スペクトル2次元プロファイルに基づいて、上記スペクトルデータに関する所定の特徴情報を得る2次元表現によるスペクトルデータの処理方法であって、

上記特徴情報に基づいて、分析対象物のスペクトルプロファイルに含まれている成分バンドのうち、少なくとも1つの成分バンドに関するバンドパラメータを推定して、少なくとも1つの成分バンドを推定し、

分析対象物のスペクトルプロファイル又は微分スペクトル2次元プロファイルから、すでに推定された特定の1つ又は複数の成分バンドのプロファイル又は微分スペクトル2次元プロファイルを除くして特定の成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイルを得て、この特定の成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイルに基づいて所定の特徴情報を得て、当該特徴情報に基づいて他の成分バンドに関するバンドパラメータを推定して、他の成分バンドを少なくとも1つ推定することを繰り返して順次成分バンドを推定することにより、

分析対象物のスペクトルプロファイルを構成する成分バンドを推定する2次元表現によるスペクトルデータの処理方法を採用した。

【0007】

すなわち、本発明は、すでに推定された特定の1つ又は複数の成分バンドを用いて、他の成分バンド（未だ推定されていないものや、より高い精度で推定したものなど）を推定して、順次成分バンドを推定していく方法である。

【0008】

具体的には、まず、微分スペクトル2次元プロファイルのスペクトルデータに関する所定の特徴情報に基づいて、分析対象物のスペクトルプロファイルに含まれている成分バンドのうち1つの成分バンド B_i （ i は1以上の整数）に関するバンドパラメータを推定して、成分バンド B_i を推定する。

次に、前記分析対象物の微分スペクトル2次元プロファイルから成分バンド B_i の微分スペクトル2次元プロファイルを除くして、 B_i 成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイルを作成するか、または前記分析対象物のスペクトルプロファイルから成分バンド B_i のプロファイルを除くして B_i 成分バンド除去スペクトルプロファイルを得て、 B_i 成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイルを作成する。

その後、当該 B_i 成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイルに基づいて所定の特徴情報を得て、当該特徴情報に基づいて分析対象物のスペクトルプロ

ファイルに含まれている成分バンドのうち、成分バンド B_i 以外の成分バンド B_j (j は i とは異なる 1 以上の整数) に関するバンドパラメータを推定して、成分バンド B_j を推定する。

【 0 0 0 9 】

次に、前記分析対象物の微分スペクトル 2 次元プロファイルから成分バンド B_j 、または成分バンド B_i 及び成分バンド B_j の微分スペクトル 2 次元プロファイルを除くして、少なくとも成分バンド B_j を除くした B_j 成分バンド除去微分スペクトル 2 次元プロファイルを作成するか、または前記分析対象物のスペクトルプロファイルから成分バンド B_j 、または成分バンド B_i 及び成分バンド B_j のプロファイルを除くして、少なくとも成分バンド B_j を除くした B_j 成分バンド除去スペクトルプロファイルを得て、 B_j 成分バンド除去微分スペクトル 2 次元プロファイルを作成する。

その後、当該 B_j 成分バンド除去微分スペクトル 2 次元プロファイルに基づいて所定の特徴情報を得て、当該特徴情報に基づいて成分バンド B_j 以外の 1 つの成分バンド B_k (k は少なくとも j とは異なる 1 以上の整数) に関するバンドパラメータを推定して、成分バンド B_k を推定する。

【 0 0 1 0 】

このようにして、成分バンドの推定、推定された単数又は複数の成分バンドに関する情報が分析対象物に関する情報から除去された微分スペクトル 2 次元プロファイルの作成、この微分スペクトル 2 次元プロファイルに基づく所定の特徴情報の取得、およびこの特徴情報に基づく他の成分バンドの推定の操作を繰り返して、分析対象物のスペクトルプロファイルに含まれる成分バンドについて、すでに推定された単数又は複数の成分バンドを用いて他の成分バンドを順次推定していく方法である。

【 0 0 1 1 】

分析対象物のスペクトルデータについての微分スペクトル 2 次元プロファイルにおいて、主要な成分バンドについての特徴情報はある程度識別されるが、主要でない成分バンドについての特徴情報は、微小なため、または、当該成分バンドと重畳している他の成分バンドの特徴情報と重なり合っているため、それ自身の

特徴情報が不明瞭となって、識別することが難しい。特に、重畳している成分バンドが主要な成分バンドの場合は、その主要でない成分バンドの方はその特徴情報が殆ど識別されえないと言える。しかし、本発明の解析方法のように、まず、分析対象物のスペクトルプロファイルの微分スペクトル2次元プロファイルの特徴情報から推定される主要な成分バンドに関する情報（例えば、スペクトルプロファイル）を、分析対象物の情報（例えば、スペクトルプロファイル）から除去して、その除去後のスペクトルプロファイルに基づいた微分スペクトル2次元プロファイルを作成すると、その主要な成分バンドの重畳により隠されていた成分バンドの特徴情報が現れ、重畳により隠されていた成分バンドの特徴情報を得ることができ、分析対象物のスペクトルデータについての微分スペクトル2次元プロファイルのみでは得ることが全くできなかった特徴情報を得ることができる。そして、すでに推定された単数又は複数の成分バンドについて、推定された単数又は複数の成分バンドのプロファイルを分析対象物の情報（例えば、スペクトルプロファイル）から除去し、その除去されたもの（例えば、スペクトルプロファイル）に基づく微分スペクトル2次元プロファイルを用いて特徴情報を得て、他の成分バンドを推定するという操作を繰り返すことにより、分析対象物のスペクトルプロファイルに含まれている成分バンドを順次、より正確に推定することができる。

【0012】

このようにして、分析対象物のスペクトルプロファイルに含まれている成分バンドを単数又は複数推定して、その単数又は複数推定した成分バンドのプロファイル又は微分スペクトル2次元プロファイルを分析対象物のスペクトルプロファイル又は微分スペクトル2次元プロファイルから除去して得られた微分スペクトル2次元プロファイルを用いて、他の成分バンドを順次導き出すことを「バンドストリッピング (Band Stripping)」と称する。

【0013】

従って、本発明の方法を用いると、容易に、分析対象物のスペクトルプロファイルに含まれている成分バンドを推定することができる。

【0014】

本発明の好適な態様では、成分バンドが、ガウス分布、ローレンツ分布又はこれらの混合型の分布のシングルバンドである。

【0015】

本発明では、 n が1及び／又は3であり、 m が $n+1$ であるであることが好ましい。 n と m との組み合わせが、 $(n, m) = (1, 2)$ 、 $(3, 4)$ であると、スペクトルデータに関する特徴情報が明確に現れる。そのため、 $(n, m) = (1, 2)$ 及び／又は $(3, 4)$ の組み合わせで、微分スペクトル2次元プロファイルを作成すると、特徴情報を得やすくなる。

【0016】

本発明の2次元表現によるスペクトルの処理方法では、 X 座標を1次微分値とし、 Y 座標を2次微分値とした微分スペクトル2次元プロファイルにおいて、当該微分スペクトル2次元プロファイルの極小点と、当該極小点から時間、波数又は波長が増加又は減少した方向における最近点の X 軸との交点を求め、前記極小点の時間、波数又は波長を X_{C1} とし、前記 X 軸との交点の時間、波数又は波長を X_{P1} とした場合において、成分バンドのバンド幅の近似値 W_{a1} を下記式(4)により求める2次元表現によるスペクトルの処理方法を好適に用いることができる。

【0017】

【数3】

$$W_{a1} = (1/A) |X_{C1} - X_{P1}| \quad (4)$$

(式中、 W_{a1} はガウス分布又はローレンツ分布のシングルバンドにおけるバンド幅の近似値である。 A は、シングルバンドがガウス分布の場合0.42466であり、ローレンツ分布の場合0.288675である。)

【0018】

また、本発明では、 X 座標を3次微分値とし、 Y 座標を4次微分値とした微分スペクトル2次元プロファイルにおいて、当該微分スペクトル2次元プロファイルの極小点と、当該極大点から時間、波数又は波長が増加又は減少した方向にお

ける最近点のX軸との交点を求め、前記極大点の時間、波数又は波長を X_{C3} とし、前記X軸との交点の時間、波数又は波長を X_{Q1} とした場合において、成分バンドのバンド幅の近似値 W_{a3} を下記式(5)により求める請求項2乃至4のいずれかの項に記載の2次元表現によるスペクトルの処理方法を好適に用いることができる。

【0019】

【数4】

$$W_{a3} = (1/B) |X_{C3} - X_{Q1}| \quad (5)$$

(式中、 W_{a3} はガウス分布又はローレンツ分布のシングルバンドにおけるバンド幅の近似値である。Bは、シングルバンドがガウス分布の場合0.31508であり、ローレンツ分布の場合0.16426である。)

【0020】

このように、成分バンドのバンド幅の近似値を得る方法では、成分バンドのピークトップから変曲点までの形状で、成分バンドのガウス分布又はローレンツ分布のシングルバンドにおけるパラメータ値を推定することが可能になる。

【0021】

本発明では、すでに推定された特定の複数の成分バンドのうち、隣り合った成分バンドをグループ化し、

分析対象物のスペクトルプロファイル又は微分スペクトル2次元プロファイルから、前記グループ化された以外の推定された全成分バンドのプロファイル又は微分スペクトル2次元プロファイルを除去してグループ化成分バンド以外除去微分スペクトル2次元プロファイルを得て、

前記グループ化された全成分バンドに関する微分スペクトル2次元プロファイルと、前記グループ化成分バンド以外除去微分スペクトル2次元プロファイルとが一致するように、必要に応じて新たな成分バンドを追加しつつ、グループ化された成分バンドに関する各成分バンド及び／又は追加成分バンドに関するバンドパラメータを調整して、グループ化された成分バンドに関する各成分バンド及び

／又は追加成分バンドのバンドパラメータを推定することを繰り返して、

分析対象物のスペクトルプロファイルを構成する成分バンドを推定する 2 次元表現によるスペクトルデータの処理方法を好適に用いることができる。

【 0 0 2 2 】

前記バンドストリッピング方法では、個々の成分バンド単独ではその成分バンドのパラメータ値を詳細には導き出すことができず、最良化を図ることができない場合がある。これは、隣接している成分バンドがオーバーラップしており、ある特定の成分バンドのパラメータ値が大き過ぎたり小さ過ぎたりすると、その過不足が隣接する成分バンドのパラメータ（バンド中心位置、バンド幅、バンド高さ）に影響を与えるためである。そのため、本発明では、隣接している複数の成分バンドをグループ化した後、個々の成分バンドのパラメータの最良化を図って、より一層正確な成分バンドのパラメータ値を推定することができる。

【 0 0 2 3 】

このように、推定した複数の成分バンドをグループ化すると、このグループに存在する成分バンドのパラメータを調整し、このグループで局所的に一致させて、個々のバンドパラメータを推定することができる。この場合、新たな成分バンドが存在すると思われるときは、新たな成分バンドを追加してグループ化し（すなわち、さらに追加成分バンドを含めてグループ化し）、このグループ化されたものに含まれる各成分バンド（はじめにグループ化された各成分バンド、および新たにグループに含められた追加成分バンド）のパラメータを調整して、このグループで局所的に一致させてもよい。

【 0 0 2 4 】

このように、分析対象物のスペクトルプロファイルに含まれている成分バンドのうち、成分バンドを複数推定した後、その推定された成分バンドにおいて隣り合った複数の成分バンドをグループ化して、このグループ化した成分バンド以外で推定されている全成分バンドに関する情報（例えば、スペクトルプロファイル）を分析対象物の情報（例えば、スペクトルプロファイル）から除去して微分スペクトル 2 次元プロファイル得て、この微分スペクトル 2 次元プロファイルに基づいて特徴情報を得て、この特徴情報からグループ化された各成分バンド及び／

又は追加成分バンドに関するバンドパラメータを導き出して、これらの成分バンドを推定して、分析対象物のスペクトルプロファイルに含まれている成分バンドを順次導き出して最良化を図ることを、「コンプレメンタリーマッチング (Complementary Matching)」と称する。

【 0 0 2 5 】

本発明では、スペクトルデータとしては、赤外スペクトル、可視スペクトル、紫外スペクトル、電子線スペクトル、X線スペクトル、 γ 線スペクトルまたはマイクロ波スペクトルによるデータが好適に用いられる。

【 0 0 2 6 】

【発明の実施の形態】

以下、本発明を図面に基づいて詳細に説明する。

図1は、水の近赤外スペクトルについて、波数 (Wavenumber (cm^{-1})) と、吸光度 (Absorbance) とを示すグラフである。なお、当該吸光度スペクトルの測定条件は次のとおりである。

【 0 0 2 7 】

水として脱イオン化した蒸留水を用い、セル長 1 mm の赤外用セルに、前記脱イオン化した蒸留水を入れ、温度制御付のホルダーにセットした後、温度 65℃ まで 5℃ 間隔で徐々に昇温させた。なお、温度制御の精度は 0.1℃ である。温度が 65℃ で安定した後、FT-IR 分光器を用いて、TGS 型検出器により、スペクトル走査回数 20 回の条件で水の近赤外の分析を行った。なお、分解能 4 cm^{-1} である。図1の水の近赤外スペクトルは、温度が 65℃ の条件であり、測定した波数の範囲は 6000~7500 (cm^{-1})、データ間隔は 4 (cm^{-1}) である。

【 0 0 2 8 】

図1に示すような吸光度スペクトルは、複数のシングルバンドの成分バンドで構成されているとみなすことができる。すなわち、吸光度スペクトルのプロファイルには、シングルバンドの成分バンドが複数含まれている。このようなシングルバンドとしては、ガウス分布 (Gauss 型の分布)、ローレンツ分布 (Lorentz 型の分布)、ガウス分布およびローレンツ分布の混合型の分布のい

れかを好適に用いることができる。

【0029】

ガウス分布を有するシングルバンド（ガウス型シングルバンド）は、下記式（1）で表される。

【0030】

【数5】

$$B_G(x) = h_G \exp \{-4 \log 2 (x - x_{GC})^2 / w_G^2\} \quad (1)$$

（式中、 x_{GC} はバンド中心位置であり、 h_G はバンド高さである。また、 w_G はバンド幅に相当する。）

【0031】

ローレンツ分布を有するシングルバンド（ローレンツ型シングルバンド）は、下記式（2）で表される。

【0032】

【数6】

$$B_L(x) = h_L / \{1 + 4 (x - x_{LC})^2 / w_L^2\} \quad (2)$$

（式中、 x_{LC} はバンド中心位置である。 w_L がバンド幅に相当する。また、 h_L がバンド高さに相当する。）

【0033】

また、ガウス分布およびローレンツ分布の混合型の分布を有するシングルバンドは下記式（3）で表される。

【数7】

$$B_{mix}(x) = m h_G \exp \{-4 \log 2 (x - x_{GC})^2 / w_G^2\} + (1-m) h_L / \{1 + 4 (x - x_{LC})^2 / w_L^2\} \quad (3)$$

（式中、 x_{GC} はガウス分布におけるバンド中心位置であり、 h_G はガウス分布

におけるバンド高さであり、 w_G はガウス分布におけるバンド幅である。 x_{LC} はローレンツ分布におけるバンド中心位置であり、 h_L はローレンツ分布におけるバンド高さであり、 w_L はローレンツ分布におけるバンド幅である。また、 m は 0 以上 1 未満の数である。)

従って、ガウス分布およびローレンツ分布の混合型の分布は、ガウス型の分布と、ローレンツ型の分布とがある割合で混合されている。

【 0 0 3 4 】

ガウス分布やローレンツ分布におけるシングルバンドを表す式 (1)、(2) において、バンド中心位置はピーク中心位置に相当する。バンド高さはピーク高さに相当し、バンド中心位置における高さ $\{B_G(x=x_{GC}), B_L(x=x_{LC})\}$ である。また、バンド幅は、バンド高さが $1/2$ のところの全幅 (Full-Width-at-Half-Height) である。従って、バンド幅はバンド高さが $1/2$ のところの 2 つの X 座標間の距離である。

【 0 0 3 5 】

本発明では、スペクトルのプロファイルに含まれているシングルバンドの成分バンドを求めるために、スペクトルに 1 次又は高次の微分を行って、その 1 次又は高次の微分値を用いて、特徴情報を得ている。なお、本明細書では、吸光度スペクトル (又は強度スペクトル) などのスペクトルを時間、波数又は波長に対して n 次微分したものを「 n 次微分スペクトル」と称する。また、 $X-Y$ 座標系としての 2 次元座標面において、少なくともいずれかの 1 つの軸に n 次微分値をとったものを「微分スペクトル 2 次元プロファイル」と称し、特に、 X 軸に n 次微分値、 Y 軸に m 次微分値をとったものを「 $n-m$ 次微分スペクトル 2 次元プロファイル」と称する。また、当該 $n-m$ 次微分スペクトル 2 次元プロファイルを「 D_n-D_m プロット」と称する場合がある。

【 0 0 3 6 】

前記水を用いて得られたスペクトルデータをテキスト型のファイルに変換した後、Mathematica (ver.2.2、Wolfram Research, Inc., IL) を用いて数学解析して、前記スペクトルデータからその 1 次微分値乃至 4 次微分値を求めた。 $X-Y$ 座標系としての 2 次元座標面において、当該水のスペクトルの 1 次微分値 (D

1) をX軸にとり、2次微分値(D2)をY軸にとった1-2次微分スペクトル2次元プロファイル(D1-D2プロット)、および3次微分値(D3)をX軸にとり、4次微分値(D4)をY軸にとった3-4次微分スペクトル2次元プロファイル(D3-D4プロット)を作成した。

【0037】

なお、当該65℃の水に関するD1-D2プロット、D3-D4プロットを作成するためのデジタル平滑と微分演算には、それぞれ、Gramの4次平滑式と3次微分式を用いた。平滑した後微分演算を繰り返して4次微分まで計算した。ウィンドウ幅は次の3つのケースを使用目的に応じて適宜選択した。

- ・ pretreatment 1 : 平滑のウィンドウ幅11点、微分のウィンドウ幅7点
- ・ pretreatment 2 : 平滑のウィンドウ幅25点、微分のウィンドウ幅7点
- ・ pretreatment 3 : 平滑のウィンドウ幅25点、微分のウィンドウ幅11点

【0038】

図2乃至図4は温度65℃の水における吸光度スペクトルに関するD1-D2プロットである。図5乃至図7は温度65℃の水における吸光度スペクトルに関するD3-D4プロットである。図2はpretreatment 1の条件で処理したD1-D2プロットであり、図3はpretreatment 2の条件で処理したD1-D2プロットであり、図4はpretreatment 3の条件で処理したD1-D2プロット（以下、「T65」と称する場合がある）である。図5はpretreatment 1の条件で処理したD3-D4プロットであり、図6はpretreatment 2の条件で処理したD3-D4プロットであり、図7はpretreatment 3の条件で処理したD3-D4プロットである。

【0039】

図2乃至図4において、pretreatment 1の条件における処理では（図2）、波数が7100 (cm^{-1}) 付近に丸まった極小が観察されるとともに、波数が6840 (cm^{-1})、6985 (cm^{-1})、7015 (cm^{-1}) 付近にシャープに尖った極小が観察される。一方、pretreatment 2の条件における処理では（図3）、上記3つのシャープに尖った極小はほとんど平坦化するとともに、その他のジグザグ状の形状も丸みを帯びている。しかし、下記に説明するバンドス

トリッピング法で典型的な極小の検出を試みると、平滑条件は少しゆるいと思われる。また、pretreatment 3 の条件における処理では（図 4）、波数が 7090 cm^{-1} 付近にやや丸まった極小が観察されるとともに、pretreatment 1 の条件における処理で観察されたシャープに尖った極小（ $6840\text{ (cm}^{-1})$ 、 $6985\text{ (cm}^{-1})$ 、 $7015\text{ (cm}^{-1})$ 付近の極小）は著しく平滑されており、波数が $6840\text{ (cm}^{-1})$ にやや丸まった極小が観察されるのみである。

【0040】

なお、図 5 乃至図 7 にかかる D3-D4 プロットは、図 2 乃至図 4 にかかる D1-D2 プロットに比べて、極小や極大が明瞭ではないので、明瞭なデータ解析を行うことは困難である。

【0041】

図 2 乃至図 4 において、現段階では、いずれのデジタル平滑・微分処理条件が適しているのか判断することは難しい。しかし、いずれのデジタル平滑・微分処理条件においても観察される D1-D2 プロット上の典型的な極小を基にして、それに対応する成分バンドのパラメータの第 1 近似値を求めることができる。すなわち、D1-D2 プロットにおいて、まずは典型的な特徴を把握することから始める。

【0042】

成分バンドのパラメータの第 1 近似値は、D1-D2 プロットを用いる場合は下記式（4）を用いて、D3-D4 プロットを用いる場合は、下記式（5）を用いて、求めることができる。

【0043】

【数 8】

$$W_{a1} = (1/A) |X_{C1} - X_{P1}| \quad (4)$$

（式中、 W_{a1} はガウス分布又はローレンツ分布のシングルバンドにおけるバンド幅の近似値である。A は、シングルバンドがガウス分布の場合 0.42466 であり、ローレンツ分布の場合 0.288675 である。 X_{C1} は、1-2 次微

分スペクトル 2 次元プロファイルの極小点の時間、波数又は波長である。また、 X_{P1} は、極小点 X_{C1} から時間、波数又は波長が増加又は減少した方向における最近点の X 軸との交点である。）

【0044】

【数 9】

$$W_{a3} = (1/B) |X_{C3} - X_{Q1}| \quad (5)$$

（式中、 W_{a3} はガウス分布又はローレンツ分布のシングルバンドにおけるバンド幅の近似値である。B は、シングルバンドがガウス分布の場合 0.31508 であり、ローレンツ分布の場合 0.16426 である。 X_{C3} は、3-4 次微分スペクトル 2 次元プロファイルの極大点の時間、波数又は波長である。また、 X_{Q1} は、極大点 X_{C3} から時間、波数又は波長が増加又は減少した方向における最近点の X 軸との交点である。）

【0045】

なお、X 軸との交点 X_{P1} (D1-D2 プロットについて) 又は X_{Q1} (D3-D4 プロットについて) としては、極小点 X_{C1} (D1-D2 プロットについて) 又は極大点 X_{C3} (D3-D4 プロットについて) から時間、波数又は波長が増加した方向における最近点の X 軸との交点までの形状と、時間、波数又は波長が減少した方向における最近点の X 軸との交点までの形状とにおいて、ガウス分布又はローレンツ分布の極小点又は極大点から時間、波数又は波長が増加した方向又は減少した方向における最近点の X 軸との交点までの形状と類似性が高い方の形状における最近点の X 軸との交点を採用することが好ましい。極小点 X_{C1} 又は極大点 X_{C3} から時間、波数又は波長が増加した方向における最近点の X 軸との交点までの形状が、ガウス分布又はローレンツ分布の極小点又は極大点から時間、波数又は波長が増加した方向における最近点の X 軸との交点までの形状と類似している場合が多いため、前記式 (3)、(4) で用いる X 軸との交点 X_{P1} や X_{Q1} としては、それぞれ、極小点 X_{C1} 、極大点 X_{C3} から時間、波数又は波長が増加した方向における最近点の X 軸との交点を用いる方が多い。しか

し、極小点 X_{C1} 又は極大点 X_{C3} から時間、波数又は波長が増加した方向における最近点のX軸との交点までの形状が、ガウス分布又はローレンツ分布の極小点又は極大点から時間、波数又は波長が増加した方向における最近点のX軸との交点までの形状と類似性が低すぎる場合は、交点 X_{P1} や X_{Q1} としては、極小点 X_{C1} 又は極大点 X_{C3} から時間、波数又は波長が減少した方向における最近点のX軸との交点を用いることができる。

【0046】

図2～4において観察されるように、デジタル平滑・微分処理条件としては、pretreatment 3の方が最も平滑性が効いており、典型的な特徴を把握することができる。そのため、まずは、平滑性の効いたpretreatment 3の条件で処理したデータを用いることが好ましい。以下、特に条件を記述しない場合は、pretreatment 3の条件で処理したデータを用いている。

【0047】

図4において、T65（温度65℃の水における吸光度スペクトルをpretreatment 3の条件で処理したD1-D2プロット）には、波数が7090 (cm^{-1})、6840 (cm^{-1})付近に典型的な極小が存在している。波数が7090 (cm^{-1})の極小点から長波数側の形状は、やや丸みを帯びてガウス分布のシングルバンドの形状に類似している。一方、波数が6840 (cm^{-1})の極小点から短波数側の形状は、ややシャープになっているため、ローレンツ分布のシングルバンドの形状に類似していると言えるが、波数点の間隔が短波長になるにつれて短くなっているため、多数のブロードなガウス分布のシングルバンドが重畳していると考えられる。

【0048】

まず、波数が7090 (cm^{-1})の極小点について解析すると、これは、前述のように、波数が7090 (cm^{-1})付近にバンドの中心位置を有するガウス分布のシングルバンドの成分バンドが出現していると解釈することができる。また、波数が7090 (cm^{-1})の極小点から長波数側の形状は、やや丸みを帯びてガウス分布のシングルバンドの形状に類似しているため、X軸との交点としては、7150 (cm^{-1})を採用することができる。従って、これらの値を

、前記式(3)に代入すると、ガウス分布を有するシングルバンドのバンド幅の近似値 W_{a1} は、約140(cm^{-1})となる。しかし、前記式(3)から導かれる W_{a1} はあくまでも近似値である。なお、この値は好ましい推定範囲の下限值である場合が多い。そのため、とりあえず、極小点の波数が7090(cm^{-1})である成分バンドのバンド幅としては、150(cm^{-1})を近似値として採用する。

【0049】

次は、バンド高さであるが、その大きさは、極小点からX軸までの距離より大きくなければならないと考えられる。ガウス分布を有するバンドを参照して計算すると、T65における7090(cm^{-1})付近の極小点からX軸までの距離は約0.45(吸光度(以下、「au」と称する場合がある))に相当している。バンド高さを変化させた時、それらのD1-D2プロットの形状は変化するが、同じ波数点は同一直線上にあることがあらかじめ分かっているので、プロット上の変化を追跡することは容易である。従って、波数が7090(cm^{-1})の極小点におけるシングルバンドのバンド高さとしては、0.6(au)を採用する。そして、下記に示すように、バンド高さを0.4~0.7(au)の範囲で選択して、バンド高さを変化させた時のD1-D2プロットの形状変化の傾向を観察しながら好適なバンドパラメータ(バンド高さなど)を探索する。

【0050】

前記波数が7090(cm^{-1})付近にバンド中心位置を有するシングルバンドの成分バンドを「第一検出バンド」と称する。この第一検出バンドにおいて、そのパラメータの初期近似値としては、前述のように、バンド中心位置:7090(cm^{-1})、バンド幅:150(cm^{-1})、バンド高さ:0.6(au)を採用することができる。前記式(1)に、 $x_{GC}=7090$ 、 $w_G=150$ 、 $h=0.6$ を代入すると、バンド中心位置:7090(cm^{-1})、バンド幅:150(cm^{-1})、バンド高さ:0.6(au)のガウス型シングルバンドが得られる。当該シングルバンドをpretreatment3の条件で1次微分及び2次微分すると、T65と同一の条件で処理したD1-D2プロット(H60)を得ることができる。図8は、H60を、T65(図4で示されるD1-D2プロット)

にオーバーレイした（重ね合わせた）ものである。図8において、H60の形状と、T65の形状とは、全体的に見れば類似していないと言える。しかし、7080～7200 (cm^{-1}) 付近の極小点から長波数側にかけての形状は、類似していると言える。

【0051】

なお、図9は、図8のグラフに、バンド中心位置：7090 (cm^{-1})、バンド幅：150 (cm^{-1})、バンド高さ：0.4 (a.u.) のガウス型シングルバンドに関するD1-D2プロット (H40) を重ねあわせたグラフである。このように、H40と、H60とを比べて明らかなように、極小位置はY軸上にあり、同一波数点は直線上に存在している。

【0052】

次に、バンド高さを変えて、いずれのバンド高さが適しているか調べる。バンド高さとして、0.40、0.50、0.60、0.70 (a.u.) の4種類を選ぶ。まずは、バンド中心位置：7090 (cm^{-1})、バンド幅：150 (cm^{-1}) において、バンド高さ：(0.40、0.50、0.60、0.70) (a.u.) のガウス型シングルバンドを作成する。当該各シングルバンドを、T65と同一の条件 (pretreatment 3 の条件) で微分処理すると、D1-D2プロットを得ることができる。当該シングルバンドにおいて、バンド高さとして、それぞれ、0.40 (a.u.) を用いたものを「H40」と、0.50 (a.u.) を用いたものを「H50」と、0.60 (a.u.) を用いたものを「H60」と、0.70 (a.u.) を用いたものを「H70」と称する。バンド高さとして、いずれの高さが適しているか調べるために、T65と、H40、H50、H60又はH70に関するD1-D2プロットとの差を求める。すなわち、T65から推定された第一検出バンドのD1-D2プロットを差し引いて除去する。

【0053】

T65と、H40、H50、H60又はH70に関するD1-D2プロットとの差を求める際には、T65から、H40、H50、H60又はH70に関するD1-D2プロットを引いて（除去して）微分スペクトル2次元プロファイルを得てもよい。なお、T65を得る前のスペクトルプロファイルから、H40、H

50、H60又はH70に関するプロファイルを除去して、この除去したものを
用いて微分スペクトル2次元プロファイルを得て、T65と、H40、H50、
H60又はH70に関するD1-D2プロットとの差を求めるてもよい。いずれ
にしても、同様の微分スペクトル2次元プロファイルが得られる。

【0054】

図10は、D1-D2プロットにおいて、T65と、H40、H50、H60
又はH70に関するD1-D2プロットとの差を示している。図11は、図10
にかかるグラフに、T65を重ねあわせたグラフである。図10～11において
、「 $G_{H1}40$ 」はT65とH40に関するD1-D2プロットとの差であり、「 $G_{H1}50$ 」
はT65とH50に関するD1-D2プロットとの差であり、「 $G_{H1}60$ 」はT65とH60
に関するD1-D2プロットとの差であり、「 $G_{H1}70$ 」はT65とH70に関するD1-D2
プロットとの差である。このように、元
になるプロファイルから、近似値として推定した成分バンドのプロファイルを差
し引いてD1-D2プロットを得ると、バンド高さを変えたときの系統的な形状
変化を読みとることができる。図10～11において、例えば、H40乃至H7
0では極小であった $7090\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ が、 $G_{H1}40$ 乃至 $G_{H1}70$ では、極大
となっている。また、同じ波数の点は直線上に存在している。特に、波数 $7090\text{ (cm}^{-1}\text{)}$
の同波数点(L7090)は、Y軸(D2軸)と平行な直線とな
っている。そして、いずれも、波数 $6990\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近が極小となってい
る。

【0055】

また、図10～11において、 $G_{H1}40$ では、波数が $7150\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付
近で極小が存在し、さらに長波数側に極大が存在している。 $G_{H1}70$ では、 $7180\text{ (cm}^{-1}\text{)}$
付近でループが存在している。これらの形状は、バンド高さが
小さすぎるか大きすぎるにより生じていると思われる。すなわち、バンド高
さの推定値として好ましくないことを意味している。従って、バンド高さとして
は $0.50\sim0.65\text{ (au)}$ が好ましい推定範囲とみなすことができる。

【0056】

次に、バンド高さを一定にして、バンド幅を変化させて、いずれのバンド幅が

適しているか調べる。このバンド高さとしては前記好ましい推定範囲のいずれかから選ぶことができる。バンド高さとして0.55 (a u)を選び、バンド幅として、140、150、160、170、180 (cm^{-1})の5種類を選ぶ。まずは、バンド中心位置：7090 (cm^{-1})、バンド高さ：0.55 (a u)において、バンド幅：(140、150、160、170、180) (cm^{-1})のガウス型シングルバンドを作成する。当該各シングルバンドを、T65と同一の条件 (pretreatment 3の条件) で微分処理すると、D1-D2プロットを得ることができる。当該シングルバンドにおいて、バンド幅として、それぞれ、140 (cm^{-1})を用いたものを「W140」と、150 (cm^{-1})を用いたものを「W150」と、160 (cm^{-1})を用いたものを「W160」と、170 (cm^{-1})を用いたものを「W170」と、180 (cm^{-1})を用いたものを「W180」と称する。バンド幅として、いずれの幅が適しているか調べるために、T65と、W140、W150、W160、W170又はW180に関するD1-D2プロットとの差を求める。すなわち、T65から推定された第一検出バンドのD1-D2プロットを差し引く。これは、前述のように、T65と、H40、H50、H60又はH70に関するD1-D2プロットとの差を求める場合と同様にして行うことができる。

【0057】

図12は、D1-D2プロットにおいて、T65と、W140、W150、W160、W170又はW180に関するD1-D2プロットとの差を示している。図13は、図12にかかるグラフに、T65を重ねあわせたグラフである。図12～13において、「 $G_{W1}140$ 」はT65とW140に関するD1-D2プロットとの差であり、「 $G_{W1}150$ 」はT65とW150に関するD1-D2プロットとの差であり、「 $G_{W1}160$ 」はT65とW160に関するD1-D2プロットとの差であり、「 $G_{W1}170$ 」はT65とW170に関するD1-D2プロットとの差であり、「 $G_{W1}180$ 」はT65とW180に関するD1-D2プロットとの差である。このように、元になるプロファイルから、近似値として推定した成分バンドのプロファイルを差し引くと、バンド幅を変えたときの系統的な形状変化を読みとることができる。図12～13において、例えば、W140

乃至 $W180$ では極小であった $7090\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ が、 $G_{H1}40$ 乃至 $G_{H1}70$ と同様に、 $G_{W1}140$ 乃至 $G_{W1}180$ では、極大となっている。また、同じ波数の点は曲線（非線形）上に存在している。そして、いずれも、波数 $6990\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近が極小となっている。

【0058】

また、図12～13において、 $G_{W1}140$ では、 $7180\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近でループが存在している。一方、 $G_{W1}180$ では、 $7090\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近が極小となっている。これらの形状は、バンド幅が小さすぎたり又は大きすぎたりすることから生じていると思われる。すなわち、バンド幅の推定値として好ましくないことを意味している。従って、バンド幅としては $150\sim170\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ が好ましい推定範囲とみなすことができる。

【0059】

従って、第一検出バンド（第一成分バンド）の第一近似値として、バンド中心位置： $7090\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $150\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.60 (au) を採用することができる。

【0060】

このようにして、第一検出バンドの推定値を求めた後、T65から、第一検出バンドに関するD1-D2プロットを差し引いて、第一検出バンドの重畳により隠されていた成分バンドを調べる。前記第一近似値のパラメータを用いて、T65から、当該第一検出バンドの第一近似値に関するD1-D2プロットを引くと（除去すると）、すなわち、バンドストリッピングすると、図14に示すグラフが得られる。

【0061】

図14は、第一近似値を用いて推定された第一検出バンドに関するD1-D2プロットを、T65から除去した第一成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイル（第1成分バンド除去D1-D2プロット）である。図14の第1成分バンド除去D1-D2プロットでは、波数が $6990\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近に典型的な極小が検出される。従って、波数が $6990\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近にバンド中心位置を有するシングルバンドの成分バンドを「第二検出バンド」として、当該第二

検出バンドのパラメータを調べる。

【0062】

図14では、T65から推定された第一検出バンド($7090\text{ (cm}^{-1}\text{)}$)付近に推定バンド中心位置を有する成分バンド)に係るD1-D2プロットを除去することにより、第二検出バンド($6990\text{ (cm}^{-1}\text{)}$)付近に推定バンド中心位置を有する成分バンド)に係る特徴情報が出現している。すなわち、第一検出バンドと第二検出バンドとは隣り合って、互いにオーバーラップしていることにより、第二検出バンドの特徴が隠されていたと言える。

【0063】

前記第一検出バンドと同様の方法により、第二検出バンド(第二成分バンド)についても、第一近似値を推定することができる。すなわち、第1成分バンド除去D1-D2プロットにおいて、極小値からバンド中心位置が推定され、X軸との交点を用いてバンド幅を推定した後、バンド高さを適宜変化させたものに関するD1-D2プロットを作成して、このD1-D2プロットをT65からバンドストリッピングして、バンド高さに関する好ましい推定範囲を求め、さらに、バンド高さを前記好ましい推定範囲のいずれかに固定して、バンド幅を適宜変化させたものに関するD1-D2プロットを作成して、このD1-D2プロットをT65からバンドストリッピングして、バンド幅に関する好ましい推定範囲を求める。

【0064】

このようにして、第二検出バンドの第一近似値を求めると、第二検出バンドの第一近似値としては、バンド中心位置： $6990\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $160\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.40 (au) を採用することができる。

【0065】

前記第二検出バンドのパラメータを用いて、T65から、当該第二検出バンドの第一近似値に関するD1-D2プロットを差し引くと、すなわち、バンドストリッピングすると、図15に示すグラフが得られる。

【0066】

図15は、第一近似値を用いて推定された第二検出バンドに関するD1-D2

プロットを、T 6 5 から除去した第2成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイル（第2成分バンド除去D 1 - D 2 プロット）である。当該第2成分バンド除去D 1 - D 2 プロットでは、おおよそではあるが、第一検出バンドとオーバーラップしている第二検出バンドが取り除かれており、第一検出バンドがより明瞭に出現していると言える。

【 0 0 6 7 】

図 1 5 に係る第2成分バンド除去D 1 - D 2 プロットでは、波数が7 0 9 5 (cm^{-1}) 付近に極小値が検出される。従って、第一検出バンドのバンド中心位置は、第一近似値で採用した7 0 9 0 (cm^{-1}) よりも、7 0 9 5 (cm^{-1}) の方がより正確であると言える。そのため、第一検出バンドのバンド中心位置を7 0 9 5 (cm^{-1}) として、前記第一検出バンドの第一近似値を求めたときと同様の方法により、第一検出バンドの第二近似値を求める。すなわち、X軸との交点を用いてバンド幅を推定した後、バンド高さを適宜変化させたものに関するD 1 - D 2 プロットを作成して、このD 1 - D 2 プロットを第2成分バンド除去D 1 - D 2 プロットからバンドストリッピングして、バンド高さに関する好ましい推定範囲を求め、さらに、バンド高さを前記好ましい推定範囲のいずれかに固定して、バンド幅を適宜変化させたものに関するD 1 - D 2 プロットを作成して、このD 1 - D 2 プロットを第2成分バンド除去D 1 - D 2 プロットからバンドストリッピングして、バンド幅に関する好ましい推定範囲を求める。このようにして、第一検出バンドの第二近似値を求めると、第一検出バンドの第二近似値としては、バンド中心位置：7 0 9 5 (cm^{-1})、バンド幅：1 5 5 (cm^{-1})、バンド高さ：0. 6 0 (a u) を採用することができる。

【 0 0 6 8 】

なお、第2成分バンド除去D 1 - D 2 プロットから第一検出バンドに係るD 1 - D 2 プロットを除去してバンドストリッピングすることは、T 6 5 から、第一検出バンド及び第二検出バンドに係るD 1 - D 2 プロットを除去してバンドストリッピングすることと同じことである。

【 0 0 6 9 】

次に、第二近似値を用いた第一検出バンド及び第一近似値を用いた第二検出バ

ンドに関するD1-D2プロットを、T65から除去してバンドストリッピングするして、新たな成分バンドを調べる。図16は第一検出バンド（第二近似値）及び第二検出バンド（第一近似値）に関するD1-D2プロットを、T65から除去した第一乃至第二成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイル（第1～2成分バンド除去D1-D2プロット）である。図16において、波数が6840 (cm^{-1}) でも典型的な極小が検出されている。

【0070】

また、図2～4でも、波数が6840 (cm^{-1}) でも典型的な極小が検出されている。従って、波数が6840 (cm^{-1}) 付近にバンド中心位置を有するシングルバンドの成分バンドを「第三検出バンド」として、当該第三検出バンドのパラメータを調べる。

【0071】

図4において、波数が6840 (cm^{-1}) の短波長側におけるX軸との交点の波数は約6780 (cm^{-1}) である。これらの値を前記式(3)に代入すると、ガウス分布を有するシングルバンドのバンド幅の近似値 W_{a1} は、約140 (cm^{-1}) となる。前述のように、前記式(3)から導かれる W_{a1} はあくまでも近似値である。しかし、前述のように、この極小値6840 (cm^{-1}) の短波長側では、短波長になるにつれて波数点の間隔が短くなっているので、多数のブロードなガウス分布のシングルバンドが重畳していると考えられ、隣り合った成分バンドによる重畳の効果が大きいと思われる。そのため、第三検出バンドの初期近似値におけるバンド幅としては、そのまま140 (cm^{-1}) を採用する。

【0072】

そして、前記第一検出バンド乃至第二検出バンドと同様の方法により、第三検出バンド（第三成分バンド）について、第一近似値を推定することができる。すなわち、T65において、極小値からバンド中心位置が推定され、X軸との交点を用いてバンド幅を推定した後、バンド高さを適宜変化させたものに関するD1-D2プロットを作成して、このD1-D2プロットをT65からバンドストリッピングして、バンド高さに関する好ましい推定範囲を求め、さらに、バンド高

さを前記好ましい推定範囲のいずれかに固定して、バンド幅を適宜変化させたものに関するD1-D2プロットを作成して、このD1-D2プロットをT65からバンドストリッピングして、バンド幅に関する好ましい推定範囲を求める。その結果、第三検出バンドの第一近似値としては、バンド中心位置： $6840\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $140\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.25 (au) を採用することができる。

【0073】

次に、第一近似値を用いた第三検出バンドに関するD1-D2プロットを、T65から除去してバンドストリッピングするして、新たな成分バンドを調べる。図17は第三検出バンド（第一近似値）に関するD1-D2プロットを、T65から除去した第三成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイル（第3成分バンド除去D1-D2プロット）である。図17に係る第3成分バンド除去D1-D2プロットでは、波数が $7090\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、 $6960\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、 $6740\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近に極小値が検出されるが、新たな成分バンドのパラメータ値を推定するのは困難である。

【0074】

そこで、T65から、第二近似値を用いた第一検出バンド、第一近似値を用いた第二検出バンド、および第一近似値を用いた第三検出バンドに関するD1-D2プロットを引いて、バンドストリッピングして、新たな成分バンドを調べる。図18は第一検出バンド（第二近似値）、第二検出バンド（第一近似値）及び第三検出バンド（第一近似値）に関するD1-D2プロットを、T65から除去した第一乃至第三成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイル（第1～3成分バンド除去D1-D2プロット）である。図18に係る第1～3成分バンド除去D1-D2プロットでは、波数が $6930\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近に典型的な極小が検出される。従って、波数が $6930\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近にバンド中心位置を有するシングルバンドの成分バンドを「第四検出バンド」として、当該第四検出バンドのパラメータを調べる。

【0075】

図18では、T65から推定された第一検出バンド、第二検出バンド及び第三

検出バンドに係る D 1 - D 2 プロットを除去することにより、第四検出バンドに係る特徴情報が出現している。すなわち、第四検出バンドは、第一検出バンド、第二検出バンド及び第三検出バンドにより、その特徴情報が隠されていたと言える。

【 0 0 7 6 】

図 1 8 において、波数が $6930 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ の長波長側における X 軸との交点の波数は約 $7030 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ である。これらの値を前記式 (3) に代入すると、ガウス分布を有するシングルバンドのバンド幅の近似値 W_{a1} は、約 $235 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ となる。

【 0 0 7 7 】

前記第一検出バンド乃至第三検出バンドと同様の方法により、第四検出バンド（第四成分バンド）についても、第一近似値を推定することができる。すなわち、第 1 ～ 3 成分バンド除去 D 1 - D 2 プロットにおいて、極小値からバンド中心位置が推定され、X 軸との交点を用いてバンド幅を推定した後、バンド高さを適宜変化させたものに関する D 1 - D 2 プロットを作成して、この D 1 - D 2 プロットを第 1 ～ 3 成分バンド除去 D 1 - D 2 プロットからバンドストリッピングして、バンド高さに関する好ましい推定範囲を求め、さらに、バンド高さを前記好ましい推定範囲のいずれかに固定して、バンド幅を適宜変化させたものに関する D 1 - D 2 プロットを作成して、この D 1 - D 2 プロットを第 1 ～ 3 成分バンド除去 D 1 - D 2 プロットからバンドストリッピングして、バンド幅に関する好ましい推定範囲を求める。

【 0 0 7 8 】

このようにして、第四検出バンドの第一近似値を求めると、第四検出バンドの第一近似値としては、バンド中心位置： $6930 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $210 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.60 (a.u.) を採用することができる。

【 0 0 7 9 】

続いて、T 6 5 から、第二近似値を用いた第一検出バンド、第一近似値を用いた第二検出バンド、第一近似値を用いた第三検出バンド、および第一近似値を用いた第四検出バンドに関する D 1 - D 2 プロットを引いて、バンドストリッピン

グして、新たな成分バンドを調べる。すなわち、第1～3成分バンド除去D1-D2プロットから、第一近似値を用いた第四検出バンドに関するD1-D2プロットをバンドストリッピングする。図19は第1～3成分バンド除去D1-D2プロットから、第四検出バンド（第一近似値）に関するD1-D2プロットを除去した第一乃至第四成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイル（第1～4成分バンド除去D1-D2プロット）である。図19に係る第1～4成分バンド除去D1-D2プロットでは、波数が $6755\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近に典型的な極小が検出される。従って、波数が $6755\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近にバンド中心位置を有するシングルバンドの成分バンドを「第五検出バンド」として、当該第五検出バンドのパラメータを調べる。

【0080】

図19では、T65から推定された第一検出バンド、第二検出バンド、第三検出バンド及び第四検出バンドに係るD1-D2プロットを除去することにより、第五検出バンドに係る特徴情報が出現している。すなわち、第五検出バンドは、第一検出バンド、第二検出バンド、第三検出バンド及び第四検出バンドにより、その特徴情報が隠されていたと言える。

【0081】

図19において、波数が $6755\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ の長波長側におけるX軸との交点の波数は約 $6830\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ である。これらの値を前記式(3)に代入すると、ガウス分布を有するシングルバンドのバンド幅の近似値 W_{a1} は、約 $175\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ となる。

【0082】

前記第一検出バンド乃至第四検出バンドと同様の方法により、第五検出バンド（第五成分バンド）についても、第一近似値を推定することができる。すなわち、第1～4成分バンド除去D1-D2プロットにおいて、極小値からバンド中心位置が推定され、X軸との交点を用いてバンド幅を推定した後、バンド高さを適宜変化させたものに関するD1-D2プロットを作成して、このD1-D2プロットを第1～4成分バンド除去D1-D2プロットからバンドストリッピングして、バンド高さに関する好ましい推定範囲を求め、さらに、バンド高さを前記好

ましい推定範囲のいずれかに固定して、バンド幅を適宜変化させたものに関する D1-D2 プロットを作成して、この D1-D2 プロットを第1～4成分バンド除去 D1-D2 プロットからバンドストリッピングして、バンド幅に関する好ましい推定範囲を求める。

【0083】

このようにして、第五検出バンドの第一近似値を求めると、第五検出バンドの第一近似値としては、バンド中心位置： $6755\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $210\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.50 (au) を採用することができる。

【0084】

続いて、第1～4成分バンド除去 D1-D2 プロットから、第一近似値を用いた第五検出バンドに関する D1-D2 プロットをバンドストリッピングする。図20は第1～4成分バンド除去 D1-D2 プロットから、第五検出バンド（第一近似値）に関する D1-D2 プロットを除去した第一乃至第五成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイル（第1～5成分バンド除去 D1-D2 プロット）である。図20に係る第1～5成分バンド除去 D1-D2 プロットでは、波数が $6620\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近に典型的な極小が検出される。従って、波数が $6620\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近にバンド中心位置を有するシングルバンドの成分バンドを「第六検出バンド」として、当該第六検出バンドのパラメータを調べる。

【0085】

図20では、T65から推定された第一検出バンド、第二検出バンド、第三検出バンド、第四検出バンド及び第五検出バンドに係る D1-D2 プロットを除去することにより、第六検出バンドに係る特徴情報が出現している。すなわち、第六検出バンドは、第一検出バンド、第二検出バンド、第三検出バンド、第四検出バンド及び第五検出バンドにより、その特徴情報が隠されていたと言える。

【0086】

図20において、波数が $6620\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ の長波長側における X 軸との交点の波数は約 $6690\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ である。これらの値を前記式(3)に代入すると、ガウス分布を有するシングルバンドのバンド幅の近似値 W_{a1} は、約 $165\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ となる。

【 0 0 8 7 】

前記第一検出バンド乃至第五検出バンドと同様の方法により、第六検出バンド（第六成分バンド）についても、第一近似値を推定することができる。すなわち、第1～5成分バンド除去D1-D2プロットにおいて、極小値からバンド中心位置が推定され、X軸との交点を用いてバンド幅を推定した後、バンド高さを適宜変化させたものに関するD1-D2プロットを作成して、このD1-D2プロットを第1～5成分バンド除去D1-D2プロットからバンドストリッピングして、バンド高さに関する好ましい推定範囲を求め、さらに、バンド高さを前記好ましい推定範囲のいずれかに固定して、バンド幅を適宜変化させたものに関するD1-D2プロットを作成して、このD1-D2プロットを第1～5成分バンド除去D1-D2プロットからバンドストリッピングして、バンド幅に関する好ましい推定範囲を求める。

【 0 0 8 8 】

このようにして、第六検出バンドの第一近似値を求めると、第六検出バンドの第一近似値としては、バンド中心位置： $6620\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $220\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.25 (au) を採用することができる。

【 0 0 8 9 】

続いて、第1～5成分バンド除去D1-D2プロットから、第一近似値を用いた第六検出バンドに関するD1-D2プロットをバンドストリッピングする。図21は第1～5成分バンド除去D1-D2プロットから、第六検出バンド（第一近似値）に関するD1-D2プロットを除去した第一乃至第六成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイル（第1～6成分バンド除去D1-D2プロット）である。図21に係る第1～6成分バンド除去D1-D2プロットでは、波数が $6480\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近に典型的な極小が検出される。従って、波数が $6480\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近にバンド中心位置を有するシングルバンドの成分バンドを「第七検出バンド」として、当該第七検出バンドのパラメータを調べる。

【 0 0 9 0 】

図21では、T65から推定された第一検出バンド、第二検出バンド、第三検出バンド、第四検出バンド、第五検出バンド及び第六検出バンドに係るD1-D

2プロットを除去することにより、第七検出バンドに係る特徴情報が出現している。すなわち、第七検出バンドは、第一検出バンド、第二検出バンド、第三検出バンド、第四検出バンド、第五検出バンド及び第六検出バンドにより、その特徴情報が隠されていたと言える。

【0091】

図21において、波数が $6480\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ の長波長側におけるX軸との交点の波数は約 $6580\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ である。これらの値を前記式(3)に代入すると、ガウス分布を有するシングルバンドのバンド幅の近似値 W_{a1} は、約 $235\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ となる。

【0092】

前記第一検出バンド乃至第六検出バンドと同様の方法により、第七検出バンド(第七成分バンド)についても、第一近似値を推定することができる。すなわち、第1～6成分バンド除去D1-D2プロットにおいて、極小値からバンド中心位置が推定され、X軸との交点を用いてバンド幅を推定した後、バンド高さを適宜変化させたものに関するD1-D2プロットを作成して、このD1-D2プロットを第1～6成分バンド除去D1-D2プロットからバンドストリッピングして、バンド高さに関する好ましい推定範囲を求め、さらに、バンド高さを前記好ましい推定範囲のいずれかに固定して、バンド幅を適宜変化させたものに関するD1-D2プロットを作成して、このD1-D2プロットを第1～6成分バンド除去D1-D2プロットからバンドストリッピングして、バンド幅に関する好ましい推定範囲を求める。

【0093】

このようにして、第七検出バンドの第一近似値を求めると、第七検出バンドの第一近似値としては、バンド中心位置： $6480\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $250\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.10 (au) を採用することができる。

【0094】

なお、図21に係る第1～6成分バンド除去D1-D2プロットでは、波数が $6480\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近以外にも、 $6900\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、 $7050\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、 $7180\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近にも極小が出現している。しかし、これらの極

小の長波長側及び／又は短波長側の形状は、全く丸みを帯びておらず、やや丸みを帯びているガウス分布のシングルバンドの形状とは異なっている。そのため、この第1～6成分バンド除去D1-D2プロットを用いて、前記第七検出バンド以外の成分バンドを導き出すことは困難である。一方、前記第一検出バンド乃至第七検出バンドでは、各検出バンドを導くためのD1-D2プロットにおいて、極小の長波長側又は短波長側の形状は、やや丸みを帯びており、ガウス分布のシングルバンドの形状と類似しているため、各検出バンドを導くことができる。

【0095】

続いて、第1～6成分バンド除去D1-D2プロットから、第一近似値を用いた第七検出バンドに関するD1-D2プロットをバンドストリッピングする。図22は第1～6成分バンド除去D1-D2プロットから、第七検出バンド（第一近似値）に関するD1-D2プロットを除去した第一乃至第七成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイル（第1～7成分バンド除去D1-D2プロット）である。図22に係る第1～7成分バンド除去D1-D2プロットでは、波数が6310 (cm^{-1}) 付近に極小が検出されるが、推定誤差が蓄積されているため、バンドパラメータを調べる為の精度が高くないと思われる。そのため、第1～7成分バンド除去D1-D2プロットを用いて、新たな成分バンドを調べることを一時中断する。

【0096】

従って、以上より、7095 (cm^{-1}) 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第一検出バンド）、6990 (cm^{-1}) 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第二検出バンド）、6930 (cm^{-1}) 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第四検出バンド）、6840 (cm^{-1}) 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第三検出バンド）、6775 (cm^{-1}) 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第五検出バンド）、6620 (cm^{-1}) 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第六検出バンド）、6480 (cm^{-1}) 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第七検出バンド）の7つの成分バンドが検出された。次に、これらの各成分バンドを基にして個々のバンドを抽出し、そのプロファイルを詳細に調べる。

【0097】

まず、バンド中心位置が $7095 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ である第一検出バンドについて調べる。前記検出された7つの成分バンドのうち第一検出バンド以外の6つの成分バンドに関するD1-D2プロットを、T65から引いて、バンドストリッピングする。すなわち、T65から、第二検出バンド、第三検出バンド、第四検出バンド、第五検出バンド、第六検出バンドおよび第七検出バンドに係るD1-D2プロットをバンドストリッピングする。

【0098】

図23～24は、T65から、第二検出バンド、第三検出バンド、第四検出バンド、第五検出バンド、第六検出バンドおよび第七検出バンドに関するD1-D2プロットを除去した第二乃至第七成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイル（第2～7成分バンド除去D1-D2プロット）である。図23はpretreatment 2の条件で処理したD1-D2プロットであり、図24はpretreatment 1の条件で処理したD1-D2プロットである。図23～24では、参照のために、バンド中心位置： $7095 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $150 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.60 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット（R60）、およびバンド中心位置： $7095 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $150 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.70 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット（R70）をオーバーレイしている。なお、図23ではR60及びR70はpretreatment 2の条件で処理されており、図23では、それぞれ $R^{1-2}60$ 、 $R^{1-2}70$ で示されている。また、図24ではR60及びR70はpretreatment 1の条件で処理されており、図24では、それぞれ $R^{1-1}60$ 、 $R^{1-1}70$ で示されている。

【0099】

図23～24において、pretreatment 2の条件で処理したD1-D2プロット（図23）と、pretreatment 1の条件で処理したD1-D2プロット（図24）とを比較すると、ノイズの平滑効果と、バンドプロファイルのひずみ効果を読みとることができる。すなわち、pretreatment 2の条件で処理したD1-D2プロットの方が、ノイズの平滑効果が大きく、バンドプロファイルの基となっている

スペクトルがひずみ、ピークが消失している。このように、デジタル平滑・微分条件によって、得られる微分スペクトル2次元プロファイル（D1-D2プロットなど）の形状に影響がある。利用目的から、ウィンドウ幅などのデジタル平滑・微分条件を適宜選択することができる。なお、スムージングがきつくなると（平滑効果が大きくなると）、元のスペクトルが平坦化したりひずんで、真の情報（本来の情報）と異なってくる場合がある。

【0100】

本発明では、前述のように、利用目的から、ウィンドウ幅は適宜選択することができるが、pretreatment 1 の条件で処理した方が、元の情報がより明瞭に現れていると言えるので、pretreatment 1 の条件を採用する方が好ましいと言える。

【0101】

図23～24に係るD1-D2プロットを用いることにより、成分バンドの型の適否（ガウス型又はローレンツ型）や未発見の成分バンドの有無を検討することができる。例えば、図23～24では、第2～7成分バンド除去D1-D2プロットは、全体的にみて、ガウス型のD1-D2プロットと類似しているので、第一検出バンドはガウス型であると言える。また、第2～7成分バンド除去D1-D2プロットの極小点はほぼY軸上にあり、極小点の波数がほぼ正しいと言える。さらに、 $7180\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ より長波長側では、第2～7成分バンド除去D1-D2プロットが、ガウス型のD1-D2プロット（R60）より内側になっており、 $7095\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ より長波長側にバンド中心位置を有する成分バンドが存在していることが読みとれる。

【0102】

次に、バンド中心位置が $6990\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ である第二検出バンドについて調べる。図25～26は、T65から、第一検出バンド、第三検出バンド、第四検出バンド、第五検出バンド、第六検出バンドおよび第七検出バンドに関するD1-D2プロットを除去した第一および第三乃至第七成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイル（第1, 3～7成分バンド除去D1-D2プロット）である。図23～24と同様に、図25はpretreatment 2 の条件で処理したD1-D2プロットであり、図26はpretreatment 1 の条件で処理したD1-D2プロ

ットである。図25～26では、参照のために、バンド中心位置： $6990\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $160\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.30 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット(R30)、およびバンド中心位置： $6990\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $160\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.50 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット(R50)をオーバーレイしている。なお、図25ではR30及びR50はpretreatment 2の条件で処理されており、図25では、それぞれ $R^{2-2}30$ 、 $R^{2-2}50$ で示されている。また、図26ではR30及びR50はpretreatment 1の条件で処理されており、図26では、それぞれ $R^{2-1}30$ 、 $R^{2-1}50$ で示されている。

【0103】

図25～26において、第1, 3～7成分バンド除去D1-D2プロットは、全体的にみて、ガウス型のD1-D2プロットと類似しているので、第二検出バンドはガウス型であると言える。また、第1, 3～7成分バンド除去D1-D2プロットの極小点はほぼY軸上にあり、極小点の波数がほぼ正しいと言える。さらに、 $7100\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ より長波長側では、第1, 3～7成分バンド除去D1-D2プロットが、ガウス型のD1-D2プロット(R30)より内側になっており、 $6990\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ より長波長側にバンド中心位置を有する成分バンドが存在していることが読みとれる。

【0104】

また、バンド中心位置が $6930\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ である第四検出バンドについて調べる。図27～28は、T65から、第一検出バンド、第二検出バンド、第三検出バンド、第五検出バンド、第六検出バンドおよび第七検出バンドに関するD1-D2プロットを除去した第一乃至第三および第五乃至第七成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイル(第1～3, 5～7成分バンド除去D1-D2プロット)である。図23～24又は図25～26と同様に、図27はpretreatment 2の条件で処理したD1-D2プロットであり、図28はpretreatment 1の条件で処理したD1-D2プロットである。図27～28では、参照のために、バンド中心位置： $6930\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $210\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.50 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット(R5

0)、およびバンド中心位置: $6930\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅: $210\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ: 0.70 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット(R70)をオーバーレイしている。なお、図27ではR50及びR70はpretreatment2の条件で処理されており、図27では、それぞれ $R^{3-2}50$ 、 $R^{3-2}70$ で示されている。また、図28ではR50及びR70はpretreatment1の条件で処理されており、図28では、それぞれ $R^{3-1}50$ 、 $R^{3-1}70$ で示されている。

【0105】

図27～28において、第1～3, 5～7成分バンド除去D1-D2プロットは、全体的にみて、ガウス型のD1-D2プロットと類似しているので、第四検出バンドはガウス型であると言える。また、第1～3, 5～7成分バンド除去D1-D2プロットの極小点はY軸上になく、短波長側にずれている。さらに、 $7080\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ より長波長側では、第1～3, 5～7成分バンド除去D1-D2プロットが、ガウス型のD1-D2プロット(R50)より内側になっている。これらのことは、隣接する成分バンドによるオーバーラップを受けていると言える。すなわち、未発見の成分バンドが、 $6930\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ より長波長側および短波長側にバンド中心位置を有する成分バンドが存在していることが読みとれる。

【0106】

なお、図28では、波数が $6920\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近にピークがあり、これは、典型的なノイズが重畳しており、実験で得られたままのスペクトルから得られたデータに近いと思われる。すなわち、pretreatment2の条件よりも、pretreatment1の条件の方が、より実験値に近いと思われる。

【0107】

次に、隣り合った成分バンドをグループ化して、このグループ化した成分バンドに係るD1-D2プロットと、前記グループ化した成分バンド以外ですでに推定された全成分バンドに係るD1-D2プロットをT65からバンドストリッピングしたD1-D2プロットとを比較して、グループ化した成分バンドに含まれている各成分バンド及び／又は新たな成分バンドを順次推定することにより、分

析対象物のスペクトルプロファイルに含まれているすべての成分バンドについて、バンドパラメータの最良化を図る。すなわち、コンプレメンタリーマッチング法を採用する。

【0108】

図29は、第二近似値を用いた第一検出バンド、第一近似値を用いた第二検出バンド、第一近似値を用いた第四検出バンドの3つの隣り合った成分バンドをグループ化して、当該グループ化された成分バンドに関するD1-D2プロット（Gr1）と、前記検出された7つの成分バンドのうち前記グループ化された検出バンド以外の4つの成分バンドに関するD1-D2プロットを、T65からバンドストリッピングしたD1-D2プロット（Gr2）とを重ね合わせたグラフである。同波数点を直線で結んで示している。図29より、両者のD1-D2プロットは一致していないが、近接していると言える。未発見の新たな成分バンドを追加も考慮して、各成分バンドのパラメータ（バンド中心位置、バンド幅、バンド高さ）を微調整して、前記2つのD1-D2プロットを一致させることにより、各成分バンドの最良化を図ることができる。

【0109】

具体的には、まず、グループ化された成分バンドに関するD1-D2プロットGr1の3つの隣り合った成分バンドにおいて、その各成分バンドの各バンド高さを微調整して、T65からバンドストリッピングしたD1-D2プロットGr2の形状に近接又は一致するように、各バンド高さを微調整する。バンド高さを変化させた時、D1-D2プロットGr1の波数点は、図10で示したように、それぞれ、ある直線上を移動することがあらかじめ分かっているために、D1-D2プロットGr2の同波数点に最も近接することができるバンド高さを容易に判断することができる。

【0110】

次に、バンドパラメータのうちバンド幅とバンド中心位置の値を微調整して、同波数点の一致度を高める。さらに、これらのバンドパラメータ（バンド高さ、バンド幅、バンド中心位置）の微調整操作を繰り返して、Gr1と、Gr2との形状の一致度を高める。

【0111】

また、Gr1と、Gr2とにおいて、同波数点の一致度が低い波長領域では、未発見の成分バンドが存在する可能性がある。図23～28に係る考察において、未発見の成分バンドが存在する可能性があることを説明したが、未発見の成分バンドとして、 $7100\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、 $7010\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、 $6900\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近にバンド中心位置を有する成分バンドを、Gr1に追加して、これらの成分バンドのバンドパラメータ（バンド中心位置、バンド幅、バンド高さ）を微調整することにより、Gr1と、Gr2との同じ波数点の一致度を高めることができる。

【0112】

図30～31は、図29に係るGr1と、Gr2とを近接又は一致させる過程を示すグラフである。徐々にGr1がGr2の形状に近接していっていることが分かる。図32は、新たな成分バンドも含めてGr1をGr2に近接又は一致させたグラフである。このように、コンプレメンタリーマッチング法を採用することにより、各成分バンドのバンドパラメータを最適化することができる。

【0113】

なお、追加した新たな成分バンド（追加成分バンド）は、バンド中心位置が $7120\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ であり、バンド幅が $230\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ であり、バンド高さが 0.20 (au) である成分バンド（第八検出バンド）、バンド中心位置が $7010\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ であり、バンド幅が $130\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ であり、バンド高さが 0.11 (au) である成分バンド（第九検出バンド）、バンド中心位置が $6900\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ であり、バンド幅が $150\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ であり、バンド高さが 0.08 (au) である成分バンド（第十検出バンド）である。

【0114】

図33は、前記と同様に、コンプレメンタリーマッチング法を用いて、第一検出バンドおよび第二検出バンドをグループ化したものに関するD1-D2プロットと、前記検出された10個の成分バンドのうち前記グループ化された検出バンド以外の8個の成分バンドに関するD1-D2プロットを、T65からバンドストリッピングしたD1-D2プロットとを比較して、各成分バンド（第一検出バ

ンド、第二検出バンド)のパラメータを微調整して一致させたグラフである。

【0115】

図34は、前記と同様に、コンプレメンタリーマッチング法を用いて、第二検出バンドおよび第三検出バンドをグループ化したものに関するD1-D2プロットと、前記検出された10個の成分バンドのうち前記グループ化された検出バンド以外の8個の成分バンドに関するD1-D2プロットを、T65からバンドストリッピングしたD1-D2プロットとを比較して、各成分バンド(第二検出バンド、第三検出バンド)のパラメータを微調整して一致させたグラフである。

【0116】

また同様に、コンプレメンタリーマッチング法を用いて、第四検出バンド、第三検出バンドおよび第五検出バンドをグループ化して、各成分バンドのパラメータを微調整して一致させて、成分バンドのパラメータの最良化を図ることができる。

【0117】

このように、コンプレメンタリーマッチング法を用いて、各成分バンドの最良化を図ることができる。すなわち、各バンドパラメータの推定確度を改善することができる。

【0118】

以上より、水について、65℃における近赤外スペクトルには、表1に示す成分バンドが含まれていると推察することができる。なお、表1では、バンド中心位置が高波数のものから順に示している。

【0119】

【表 1】

表 1

成分バンド名	バンド中心位置 (cm^{-1})	バンド幅 (cm^{-1})	バンド高さ (吸光度)
成分バンド(1)	7120	230	0.20
成分バンド(2)	7095	155	0.55
成分バンド(3)	7010	130	0.11
成分バンド(4)	6985	175	0.34
成分バンド(5)	6930	210	0.57
成分バンド(6)	6900	150	0.08
成分バンド(7)	6835	145	0.26
成分バンド(8)	6755	195	0.47
成分バンド(9)	6620	220	0.26
成分バンド(10)	6460	240	0.12

【0120】

従って、コンプレメンタリーマッチング法により、 $7095 (\text{cm}^{-1})$ 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第一検出バンド）では、バンド高さが $0.55 (\text{a.u.})$ と変更されて、全パラメータが推定された。 $6990 (\text{cm}^{-1})$ 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第二検出バンド）では、バンド中心位置が $6985 (\text{cm}^{-1})$ に、バンド幅が $175 (\text{cm}^{-1})$ に、バンド高さが $0.34 (\text{a.u.})$ に変更されて、全パラメータが推定された。 $6930 (\text{cm}^{-1})$ 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第四検出バンド）では、バンド高さが $0.57 (\text{a.u.})$ に変更されて、全パラメータが推定された。 $6840 (\text{cm}^{-1})$ 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第三検出バンド）では、バンド中心位置が $6835 (\text{cm}^{-1})$ に、バンド幅が $145 (\text{cm}^{-1})$ に、バンド高さが $0.26 (\text{a.u.})$ に変更されて、全パラメータが推定された。 $6775 (\text{cm}^{-1})$ 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第五検出バンド）では、バンド幅が $195 (\text{cm}^{-1})$ に、バンド高さが $0.47 (\text{a.u.})$ に変更されて、全パラメータが推定された。 $6620 (\text{cm}^{-1})$ 付近にバンド中心位置を有する成分バンド（第六検出バンド）では、バンド高さが $0.26 (\text{a.u.})$ に変更されて、全パラメータが推定された。 $6480 (\text{cm}^{-1})$ 付近にバ

ンド中心位置を有する成分バンド（第七検出バンド）では、バンド中心位置が6460 (cm^{-1}) に、バンド幅が240 (cm^{-1}) に、バンド高さが0.12 (a.u.) に変更されて、全パラメータが推定された。

【0121】

そして、バンド中心位置が7120 (cm^{-1}) であり、バンド幅が230 (cm^{-1}) であり、バンド高さが0.20 (a.u.) である成分バンド（第八検出バンド）と、バンド中心位置が7010 (cm^{-1}) であり、バンド幅が130 (cm^{-1}) であり、バンド高さが0.11 (a.u.) である成分バンド（第九検出バンド）と、バンド中心位置が6900 (cm^{-1}) であり、バンド幅が150 (cm^{-1}) であり、バンド高さが0.08 (a.u.) である成分バンド（第十検出バンド）とが新たに推定された。

【0122】

表1に示されている成分バンド（1）～（10）について、そのプロファイルを図35～図44に示す。なお、図35～図44において、各プロファイルを得るためのデータ処理条件はpretreatment1の条件である。

【0123】

図35は、成分バンド（1）～（10）において、成分バンド（1）以外の成分バンド（すなわち、成分バンド（2）～（10））に係るD1-D2プロットを、T65から除去して得られたD1-D2プロットを示すグラフである。なお、参照のために、バンド中心位置：7120 (cm^{-1})、バンド幅：230 (cm^{-1})、バンド高さ：0.20 (a.u.) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット ($R_{(1)}20$)、およびバンド中心位置：7120 (cm^{-1})、バンド幅：230 (cm^{-1})、バンド高さ：0.30 (a.u.) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット ($R_{(1)}30$) をオーバーレイしている。

【0124】

図36は、成分バンド（1）～（10）において、成分バンド（2）以外の成分バンド（すなわち、成分バンド（1）および（3）～（10））に係るD1-D2プロットを、T65から除去して得られたD1-D2プロットを示すグラフである。なお、参照のために、バンド中心位置：7095 (cm^{-1})、バンド

幅: $155 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ: 0.55 (au) のガウス型のバンドに係る D1-D2 プロット ($R_{(2)} 55$)、およびバンド中心位置: $7095 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅: $155 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ: 0.70 (au) のガウス型のバンドに係る D1-D2 プロット ($R_{(2)} 70$) をオーバーレイしている。

【0125】

図 37 は、成分バンド (1) ~ (10) において、成分バンド (3) 以外の成分バンド (すなわち、成分バンド (1) ~ (2) および (4) ~ (10)) に係る D1-D2 プロットを、T65 から除去して得られた D1-D2 プロットを示すグラフである。なお、参照のために、バンド中心位置: $7010 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅: $130 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ: 0.11 (au) のガウス型のバンドに係る D1-D2 プロット ($R_{(3)} 11$)、およびバンド中心位置: $7010 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅: $130 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ: 0.16 (au) のガウス型のバンドに係る D1-D2 プロット ($R_{(3)} 16$) をオーバーレイしている。

【0126】

図 38 は、成分バンド (1) ~ (10) において、成分バンド (4) 以外の成分バンド (すなわち、成分バンド (1) ~ (3) および (5) ~ (10)) に係る D1-D2 プロットを、T65 から除去して得られた D1-D2 プロットを示すグラフである。なお、参照のために、バンド中心位置: $6985 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅: $175 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ: 0.34 (au) のガウス型のバンドに係る D1-D2 プロット ($R_{(4)} 34$)、およびバンド中心位置: $6985 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅: $175 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ: 0.50 (au) のガウス型のバンドに係る D1-D2 プロット ($R_{(4)} 50$) をオーバーレイしている。

【0127】

図 39 は、成分バンド (1) ~ (10) において、成分バンド (5) 以外の成分バンド (すなわち、成分バンド (1) ~ (4) および (6) ~ (10)) に係る D1-D2 プロットを、T65 から除去して得られた D1-D2 プロットを示

すグラフである。なお、参照のために、バンド中心位置： $6930\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $210\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.57 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット ($R_{(5)} 57$)、およびバンド中心位置： $6930\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $210\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.70 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット ($R_{(5)} 70$)をオーバーレイしている。

【0128】

図40は、成分バンド(1)～(10)において、成分バンド(6)以外の成分バンド(すなわち、成分バンド(1)～(5)および(7)～(10))に係るD1-D2プロットを、T65から除去して得られたD1-D2プロットを示すグラフである。なお、参照のために、バンド中心位置： $6900\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $150\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.08 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット ($R_{(6)} 08$)、およびバンド中心位置： $6900\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $150\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.14 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット ($R_{(6)} 14$)をオーバーレイしている。

【0129】

図41は、成分バンド(1)～(10)において、成分バンド(7)以外の成分バンド(すなわち、成分バンド(1)～(6)および(8)～(10))に係るD1-D2プロットを、T65から除去して得られたD1-D2プロットを示すグラフである。なお、参照のために、バンド中心位置： $6835\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $145\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.26 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット ($R_{(7)} 26$)、およびバンド中心位置： $6835\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $145\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.40 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット ($R_{(7)} 40$)をオーバーレイしている。

【0130】

図42は、成分バンド(1)～(10)において、成分バンド(8)以外の成分バンド(すなわち、成分バンド(1)～(7)および(9)～(10))に係

るD1-D2プロットを、T65から除去して得られたD1-D2プロットを示すグラフである。なお、参照のために、バンド中心位置： $6755\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $195\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.47 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット(R₍₈₎47)、およびバンド中心位置： $6755\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $195\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.60 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット(R₍₈₎60)をオーバーレイしている。

【0131】

図43は、成分バンド(1)～(10)において、成分バンド(9)以外の成分バンド(すなわち、成分バンド(1)～(8)および(10))に係るD1-D2プロットを、T65から除去して得られたD1-D2プロットを示すグラフである。なお、参照のために、バンド中心位置： $6620\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $220\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.26 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット(R₍₉₎26)、およびバンド中心位置： $6620\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $220\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.30 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット(R₍₉₎30)をオーバーレイしている。

【0132】

図44は、成分バンド(1)～(10)において、成分バンド(10)以外の成分バンド(すなわち、成分バンド(1)～(9))に係るD1-D2プロットを、T65から除去して得られたD1-D2プロットを示すグラフである。なお、参照のために、バンド中心位置： $6460\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $240\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.11 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット(R₍₁₀₎11)、およびバンド中心位置： $6460\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $240\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.15 (au) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット(R₍₁₀₎15)をオーバーレイしている。

【0133】

図35乃至図44では、各D1-D2プロットについての波数点も表記している。また、参照用のガウス型バンドについて、同波数点を結んでいる。ガウス型

バンドでは、前述のように、高さのみを変えた場合は、同波数点は同一直線上にある。

【0134】

図35乃至図44で示されるように、分析対象物のスペクトル（水の近赤外スペクトル）に含まれると推定された各成分バンドは、ガウス型バンドとほとんど一致している。また、波数点もほとんど一致している。すなわち、本発明の方法を用いると、ガウス型関数で極めてよく近似することができるシングルバンドを検出することができる。

【0135】

このように、抽出された各成分バンドと、ガウス型のシングルバンドとの比較では、その形状だけでなく、波数点も含めて、両者の一致の程度を目視で観察することができる。

【0136】

なお、図35において、長波数側がガウス型バンドより内側になっているので、この長波数側に新たなバンドが存在していることを読みとることができる。また、図44において、短波数側がガウス型バンドより内側になっているので、この短波数側に新たなバンドが存在していることを読みとることができる。しかし、これらのバンドは解析結果にほとんど影響を与えていない。そのため、バンドパラメータの推定は行わないことにするが、バンドパラメータ値の推定を行う場合は、前記バンドストリッピング法およびコンプレメンタリーマッチング法を用いて行うことにより、新たなバンドのバンドパラメータ値を推定することができる。

【0137】

また、図40では、成分バンド（6）のバンド高さが低く、相対的に大きいノイズ成分が重畳しているため、成分バンド（6）は、バンドであるか残成分であるかの判断が難しい。

【0138】

T65から成分バンド（1）～（10）を差し引くと、残成分が残る。この残成分にはノイズ成分も含まれていると思われる。次に、前記ノイズ成分を含む残

成分を観察してみる。D1-D2プロットは、ノイズが重畳した平坦な曲線を直接観察するのは不向きである。しかし、残成分に仮想バンドを加算したD1-D2プロットを用いて観察することができる。図45は、前記残成分に仮想バンド（バンド中心位置： $6900\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $400\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.80 (au) ）のガウス型バンドを加算して得られたD1-D2プロット（残成分プロット）を示すグラフである。なお、バンド中心位置： $6900\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド幅： $400\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、バンド高さ： 0.80 (au) ）のガウス型バンドに係るD1-D2プロット（R₍₁₁₎80）をオーバーレイしている。

【0139】

図45より、 $6840\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、 $6920\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 、 $7012\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近にシャープなピーク又は突起が見られる。これらはノイズであると判断することができる。本解析方法を採用すると、シャープなノイズはスライスして切除することができる。すなわち、本解析方法を用いると、デジタルスムージング（digital smoothing）の弊害であるバンドのひずみ現象を避けることができる。

【0140】

前記推定した成分バンドをすべて重ね合わせて得られたスペクトルと、分析対象物の近赤外スペクトルとを比較して、推定した成分バンドが適切であるか調べる。図46は、推定した成分バンド（1）～（10）を示すスペクトルと、これらの成分バンドを重ね合わせて得られたスペクトル（S_{REC}）のグラフである。図47は、推定した成分バンド（1）～（10）を重ね合わせて得られたスペクトル（S_{REC}）と、分析対象物の近赤外スペクトル（S_{H2O}）とをオーバーレイしたグラフである。

【0141】

図47より、S_{H2O}とS_{REC}とはオフセット成分（両スペクトルの差）が存在している。本発明の方法では、微分を用いており、1次微分ではバイアス成分、2次微分では傾斜した直線成分の影響がないため、前記オフセット成分が生じている。

【 0 1 4 2 】

前記推定した成分バンド（成分バンド（1）～（10））をすべて重ね合わせて得られたスペクトルに係るD1-D2プロット（全成分プロット）と、分析対象物の近赤外スペクトルに係るD1-D2プロット（T65）とを比較する。図48は、推定した成分バンド（1）～（10）を示すスペクトルに係るD1-D2プロット（全成分プロット）と、T65（温度65℃の水における吸光度スペクトルをpretreatment3の条件で処理したD1-D2プロット）とをオーバーレイしたグラフである。両者はほぼ一致していると言える。

【 0 1 4 3 】

また、 S_{H_2O} において、 $7500\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ 付近は、傾斜した直線に近い曲線であるため、ベースライン成分か、成分バンドのすその部分かの判定は困難である。一方、短波数側の詳細な解析には、 $5200\text{ (cm}^{-1}\text{)}$ の水の吸収ピークについてすその部分の処理が必要である。

【 0 1 4 4 】

なお、推定された成分バンド（1）～（10）を用いて、再度、バンドストリッピング法およびコンプレメンタリーマッチング法を適用して、各成分バンドのパラメータ値を再度推定することによって、各成分バンドについて、より最良化されたパラメータ値を推定することができる。

【 0 1 4 5 】

以上、本発明の方法を要約すると、

（1）分析対象物のスペクトルの微分スペクトル2次元プロファイル（D1-D2プロットなど）について、典型的なピーク（極小など）に注目して、対応する成分バンドのパラメータ値を推定する。

（2）推定された成分バンドを用いて、バンドストリッピングすることにより、順次主要な成分バンドを導き、その成分バンドのパラメータ値を推定する。

（3）主要な成分バンドを推定した後、個々の成分バンドのプロファイルを観察して、バンド型の適否や未発見のバンドの有無を検討する。

（4）コンプレメンタリーマッチング法を用いて、各成分バンド間の影響を考慮して、推定されたバンドパラメータ値を最良化して改善する。

(5) 一般的には、個々の成分バンドのプロファイル(D1-D2プロットなど)を取り出すと、線対称性のよいシングルバンドが抽出できるので、最良フィッティングのバンド型からバンドパラメータを推定する。

(6) 必要に応じて、以上により推定された確からしいバンドパラメータ値を初期近似値として、最初のステップから解析を繰り返して、一層最良化された成分バンドのパラメータ値を導き出す。

【0146】

なお、前記水の近赤外スペクトルについては、バンド中心位置およびバンド幅についてはデータ間隔程度、バンド高さについては目視観察による誤差1%程度の誤差が生じている可能性がある。すなわち、バンドパラメータの推定の確かさは、分析対象物のスペクトルについてのデータ間隔および目視観察時の観察の程度に依存する。

【0147】

本発明では、ノイズや波形のひずみの影響は、デジタル平滑・微分条件を変えたときの差異を比較観察することで克服することができる。

【0148】

特に、本発明では、分析対象物について、得られたデータの解析方法にポイントがあり、そのデータを得るためには、従来の分析機器をそのまま用いることができ、新たな分析機器を要しなくてもよい。分析機器によるスペクトル情報を出力して、本発明の処理方法を有する機器又はコンピュータに入力し、その計算処理をすることによって、分析対象物のスペクトルデータから成分バンドを推定することができる。もちろん、分析機器に本発明の処理方法を導入してもよい。

【0149】

なお、図1～48において、単位として「 $\times 10 E - 3$ 」と記載されているのは、「 $\times 10^{-3}$ 」のことを意味している。また、単位として「 $\times 10 E - 2$ 」と記載されているのは、「 $\times 10^{-2}$ 」のことを意味している。すなわち、単位として「 $\times 10 E - a$ (aは1以上の整数である)」と記載されているのは、「 $\times 10^{-a}$ 」のことを意味している。

【0150】

【発明の効果】

本発明のスペクトルデータの処理方法を用いると、複数の成分バンドを含有しているスペクトルプロファイルを有する分析対象物について、その複数の成分バンドを容易に推定することができる。

【図面の簡単な説明】

【図 1】 図 1 は、水の近赤外スペクトルについて波数と吸光度とを示すグラフである。

【図 2】 図 2 は、温度 6 5℃の水における吸光度スペクトルを、pretreatment 1 の条件で処理した D 1 - D 2 プロットを示すグラフである。

【図 3】 図 3 は、温度 6 5℃の水における吸光度スペクトルを、pretreatment 2 の条件で処理した D 1 - D 2 プロットを示すグラフである。

【図 4】 図 4 は、温度 6 5℃の水における吸光度スペクトルを、pretreatment 3 の条件で処理した D 1 - D 2 プロットを示すグラフである。

【図 5】 図 5 は、温度 6 5℃の水における吸光度スペクトルを、pretreatment 1 の条件で処理した D 3 - D 4 プロットを示すグラフである。

【図 6】 図 6 は、温度 6 5℃の水における吸光度スペクトルを、pretreatment 2 の条件で処理した D 3 - D 4 プロットを示すグラフである。

【図 7】 図 7 は、温度 6 5℃の水における吸光度スペクトルを、pretreatment 3 の条件で処理した D 3 - D 4 プロットを示すグラフである。

【図 8】 図 8 は、H 6 0 を T 6 5 にオーバーレイしたグラフである。

【図 9】 図 9 は、図 8 のグラフに、H 4 0 を重ねあわせたグラフである。

【図 1 0】 図 1 0 は、T 6 5 と、H 4 0、H 5 0、H 6 0 又は H 7 0 に関する D 1 - D 2 プロットとの差を示しているグラフである。

【図 1 1】 図 1 1 は、図 1 0 に係るグラフに T 6 5 を重ねあわせたグラフである。

【図 1 2】 図 1 2 は、T 6 5 と、W 1 4 0、W 1 5 0、W 1 6 0、W 1 7 0 又は W 1 8 0 に関する D 1 - D 2 プロットとの差を示しているグラフである。

【図 1 3】 図 1 3 は、図 1 2 に係るグラフに T 6 5 を重ねあわせたグラフである。

【図 1 4】 図 1 4 は、第一検出バンドに関する $D1-D2$ プロットを、T 6 5 から除去した第一成分バンド除去微分スペクトル 2 次元プロファイルを示すグラフである。

【図 1 5】 図 1 5 は、第二検出バンド（第一近似値）に関する $D1-D2$ プロットを、T 6 5 から除去した第 2 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットである。

【図 1 6】 図 1 6 は、第一検出バンド（第二近似値）及び第二検出バンド（第一近似値）に関する $D1-D2$ プロットを、T 6 5 から除去した第 1 ～ 2 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットである。

【図 1 7】 図 1 7 は、第三検出バンド（第一近似値）に関する $D1-D2$ プロットを、T 6 5 から除去した第 3 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットである。

【図 1 8】 図 1 8 は、第一検出バンド（第二近似値）、第二検出バンド（第一近似値）及び第三検出バンド（第一近似値）に関する $D1-D2$ プロットを、T 6 5 から除去した第 1 ～ 3 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットである。

【図 1 9】 図 1 9 は、第 1 ～ 3 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットから、第四検出バンド（第一近似値）に関する $D1-D2$ プロットを除去した第 1 ～ 4 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットである。

【図 2 0】 図 2 0 は、第 1 ～ 4 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットから、第五検出バンド（第一近似値）に関する $D1-D2$ プロットを除去した第 1 ～ 5 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットである。

【図 2 1】 図 2 1 は、第 1 ～ 5 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットから、第六検出バンド（第一近似値）に関する $D1-D2$ プロットを除去した第 1 ～ 6 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットである。

【図 2 2】 図 2 2 は、第 1 ～ 6 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットから、第七検出バンド（第一近似値）に関する $D1-D2$ プロットを除去した第 1 ～ 7 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットである。

【図 2 3】 図 2 3 は、pretreatment 2 の条件により、T 6 5 から、第二検出バンド、第三検出バンド、第四検出バンド、第五検出バンド、第六検出バンドおよび第七検出バンドに関する $D1-D2$ プロットを除去した第 2 ～ 7 成分バンド除去 $D1-D2$ プロットである。

【図 2 4】 図 2 4 は、pretreatment 1 の条件により、T 6 5 から、第二検出バンド、第三検出バンド、第四検出バンド、第五検出バンド、第六検出バンドおよび第七検出バンドに関する D 1 - D 2 プロットを除去した第 2 ~ 7 成分バンド除去 D 1 - D 2 プロットである。

【図 2 5】 図 2 5 は、pretreatment 2 の条件により、T 6 5 から、第一検出バンド、第三検出バンド、第四検出バンド、第五検出バンド、第六検出バンドおよび第七検出バンドに関する D 1 - D 2 プロットを除去した第 1, 3 ~ 7 成分バンド除去 D 1 - D 2 プロットである。

【図 2 6】 図 2 6 は、pretreatment 1 の条件により、T 6 5 から、第一検出バンド、第三検出バンド、第四検出バンド、第五検出バンド、第六検出バンドおよび第七検出バンドに関する D 1 - D 2 プロットを除去した第 1, 3 ~ 7 成分バンド除去 D 1 - D 2 プロットである。

【図 2 7】 図 2 7 は、pretreatment 2 の条件により、T 6 5 から、第一検出バンド、第二検出バンド、第三検出バンド、第五検出バンド、第六検出バンドおよび第七検出バンドに関する D 1 - D 2 プロットを除去した第 1 ~ 3, 5 ~ 7 成分バンド除去 D 1 - D 2 プロットである。

【図 2 8】 図 2 8 は、pretreatment 1 の条件により、T 6 5 から、第一検出バンド、第二検出バンド、第三検出バンド、第五検出バンド、第六検出バンドおよび第七検出バンドに関する D 1 - D 2 プロットを除去した第 1 ~ 3, 5 ~ 7 成分バンド除去 D 1 - D 2 プロットである。

【図 2 9】 図 2 9 は、第一検出バンド（第二近似値）、第二検出バンド（第一近似値）、第四検出バンド（第一近似値）のグループ化された成分バンドに関する D 1 - D 2 プロット（G r 1）と、前記グループ化された検出バンド以外の 4 つの成分バンドに関する D 1 - D 2 プロットを、T 6 5 からバンドストリッピングした D 1 - D 2 プロット（G r 2）とを重ね合わせたグラフである。

【図 3 0】 図 3 0 は、図 2 9 に係る G r 1 と、G r 2 とを近接又は一致させる過程を示すグラフである。

【図 3 1】 図 3 1 は、図 2 9 に係る G r 1 と、G r 2 とを近接又は一致させる過程を示すグラフである。

【図 3 2】 図 3 2 は、新たな成分バンドも含めて $G_r 1$ を $G_r 2$ に近接又は一致させたグラフである。

【図 3 3】 図 3 3 は、第一検出バンドおよび第二検出バンドをグループ化したものに関する $D 1 - D 2$ プロットと、前記グループ化された検出バンド以外の 8 個の成分バンドに関する $D 1 - D 2$ プロットを、 $T 6 5$ からバンドストリッピングした $D 1 - D 2$ プロットとを、各成分バンドのパラメータの微調整により一致させたグラフである。

【図 3 4】 図 3 4 は、第二検出バンドおよび第三検出バンドをグループ化したものに関する $D 1 - D 2$ プロットと、前記グループ化された検出バンド以外の 8 個の成分バンドに関する $D 1 - D 2$ プロットを、 $T 6 5$ からバンドストリッピングした $D 1 - D 2$ プロットとを、各成分バンドのパラメータの微調整により一致させたグラフである。

【図 3 5】 図 3 5 は、成分バンド (1) ~ (10) において、成分バンド (1) 以外の成分バンドに係る $D 1 - D 2$ プロットを、 $T 6 5$ から除去して得られた $D 1 - D 2$ プロットを示すグラフである。

【図 3 6】 図 3 6 は、成分バンド (1) ~ (10) において、成分バンド (2) 以外の成分バンドに係る $D 1 - D 2$ プロットを、 $T 6 5$ から除去して得られた $D 1 - D 2$ プロットを示すグラフである。

【図 3 7】 図 3 7 は、成分バンド (1) ~ (10) において、成分バンド (3) 以外の成分バンドに係る $D 1 - D 2$ プロットを、 $T 6 5$ から除去して得られた $D 1 - D 2$ プロットを示すグラフである。

【図 3 8】 図 3 8 は、成分バンド (1) ~ (10) において、成分バンド (4) 以外の成分バンドに係る $D 1 - D 2$ プロットを、 $T 6 5$ から除去して得られた $D 1 - D 2$ プロットを示すグラフである。

【図 3 9】 図 3 9 は、成分バンド (1) ~ (10) において、成分バンド (5) 以外の成分バンドに係る $D 1 - D 2$ プロットを、 $T 6 5$ から除去して得られた $D 1 - D 2$ プロットを示すグラフである。

【図 4 0】 図 4 0 は、成分バンド (1) ~ (10) において、成分バンド (6) 以外の成分バンドに係る $D 1 - D 2$ プロットを、 $T 6 5$ から除去して得られた

D 1 - D 2 プロットを示すグラフである。

【図 4 1】 図 4 1 は、成分バンド (1) ~ (1 0) において、成分バンド (7) 以外の成分バンドに係る D 1 - D 2 プロットを、T 6 5 から除去して得られた D 1 - D 2 プロットを示すグラフである。

【図 4 2】 図 4 2 は、成分バンド (1) ~ (1 0) において、成分バンド (8) 以外の成分バンドに係る D 1 - D 2 プロットを、T 6 5 から除去して得られた D 1 - D 2 プロットを示すグラフである。

【図 4 3】 図 4 3 は、成分バンド (1) ~ (1 0) において、成分バンド (9) 以外の成分バンドに係る D 1 - D 2 プロットを、T 6 5 から除去して得られた D 1 - D 2 プロットを示すグラフである。

【図 4 4】 図 4 4 は、成分バンド (1) ~ (1 0) において、成分バンド (1 0) 以外の成分バンドに係る D 1 - D 2 プロットを、T 6 5 から除去して得られた D 1 - D 2 プロットを示すグラフである。

【図 4 5】 図 4 5 は、残成分に仮想バンドを加算して得られた D 1 - D 2 プロットを示すグラフである。

【図 4 6】 図 4 6 は、推定した成分バンド (1) ~ (1 0) を示すスペクトルと、これらの成分バンドを重ね合わせて得られたスペクトルのグラフである。

【図 4 7】 図 4 7 は、推定した成分バンド (1) ~ (1 0) を重ね合わせて得られたスペクトルと、分析対象物の近赤外スペクトルとをオーバーレイしたグラフである。

【図 4 8】 図 4 8 は、推定した成分バンド (1) ~ (1 0) を示すスペクトルに係る D 1 - D 2 プロットと、T 6 5 とをオーバーレイしたグラフである。

【符号の説明】

T 6 5 温度 6 5℃の水における近赤外スペクトルをpretreatment 3 の条件で処理した D 1 - D 2 プロット

H 6 0 バンド中心位置：7 0 9 0 (cm^{-1})、バンド幅：1 5 0 (cm^{-1})、バンド高さ：0. 6 (a u) のガウス型シングルバンドをpretreatment 3 の条件で 1 次微分及び 2 次微分して得られた D 1 - D 2 プロット

H 4 0 バンド中心位置：7 0 9 0 (cm^{-1})、バンド幅：1 5 0 (

cm^{-1})、バンド高さ: 0.4 (a u) のガウス型シングルバンドをpretreatment 3 の条件で1次微分及び2次微分して得られたD1-D2プロット

$G_{H1} 40$ T65と、H40に関するD1-D2プロットとの差

$G_{H1} 60$ T65と、H60に関するD1-D2プロットとの差

$G_{W1} 140$ T65と、バンド中心位置: $7090 (\text{cm}^{-1})$ 、バンド高さ: 0.55 (a u) において、バンド幅: $140 (\text{cm}^{-1})$ のガウス型シングルバンド (W140) に関するD1-D2プロットとの差

$G_{W1} 160$ T65と、バンド中心位置: $7090 (\text{cm}^{-1})$ 、バンド高さ: 0.55 (a u) において、バンド幅: $160 (\text{cm}^{-1})$ のガウス型シングルバンド (W160) に関するD1-D2プロットとの差

$G_{W1} 180$ T65と、バンド中心位置: $7090 (\text{cm}^{-1})$ 、バンド高さ: 0.55 (a u) において、バンド幅: $180 (\text{cm}^{-1})$ のガウス型シングルバンド (W180) に関するD1-D2プロットとの差

$R^{1-2} 60$ バンド中心位置: $7095 (\text{cm}^{-1})$ 、バンド幅: $150 (\text{cm}^{-1})$ 、バンド高さ: 0.60 (a u) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット (pretreatment 2 の条件)

$R^{1-2} 70$ バンド中心位置: $7095 (\text{cm}^{-1})$ 、バンド幅: $150 (\text{cm}^{-1})$ 、バンド高さ: 0.70 (a u) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット (pretreatment 2 の条件)

$R^{1-1} 60$ バンド中心位置: $7095 (\text{cm}^{-1})$ 、バンド幅: $150 (\text{cm}^{-1})$ 、バンド高さ: 0.60 (a u) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット (pretreatment 1 の条件)

$R^{1-1} 70$ バンド中心位置: $7095 (\text{cm}^{-1})$ 、バンド幅: $150 (\text{cm}^{-1})$ 、バンド高さ: 0.70 (a u) のガウス型のバンドに係るD1-D2プロット (pretreatment 1 の条件)

Gr 1 第一検出バンド (第二近似値)、第二検出バンド (第一近似値)、第四検出バンド (第一近似値) のグループ化された成分バンドに関するD1-D2プロット

Gr 2 Gr 1に含まれる検出バンド以外の4つの成分バンドに関する

D 1 - D 2 プロットを、T 6 5 からバンドストリッピングした D 1 - D 2 プロット

残成分プロット 残成分に仮想バンド（バンド中心位置：6 9 0 0 (cm^{-1})、バンド幅：4 0 0 (cm^{-1})、バンド高さ：0. 8 0 (a u) のガウス型バンド) を加算して得られた D 1 - D 2 プロット

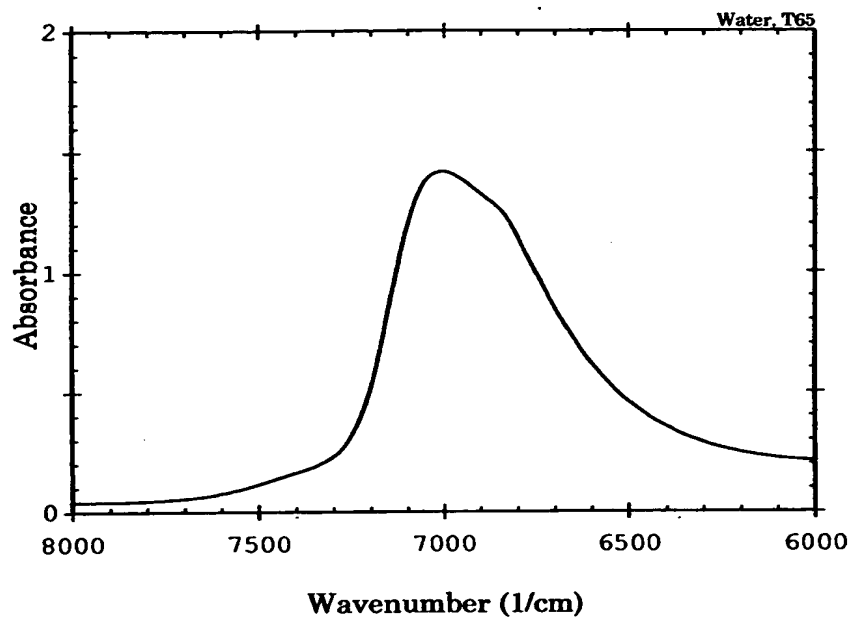
S_{REC} 成分バンド (1) ~ (1 0) を重ね合わせて得られたスペクトル

$S_{\text{H}_2\text{O}}$ 分析対象物の近赤外スペクトル

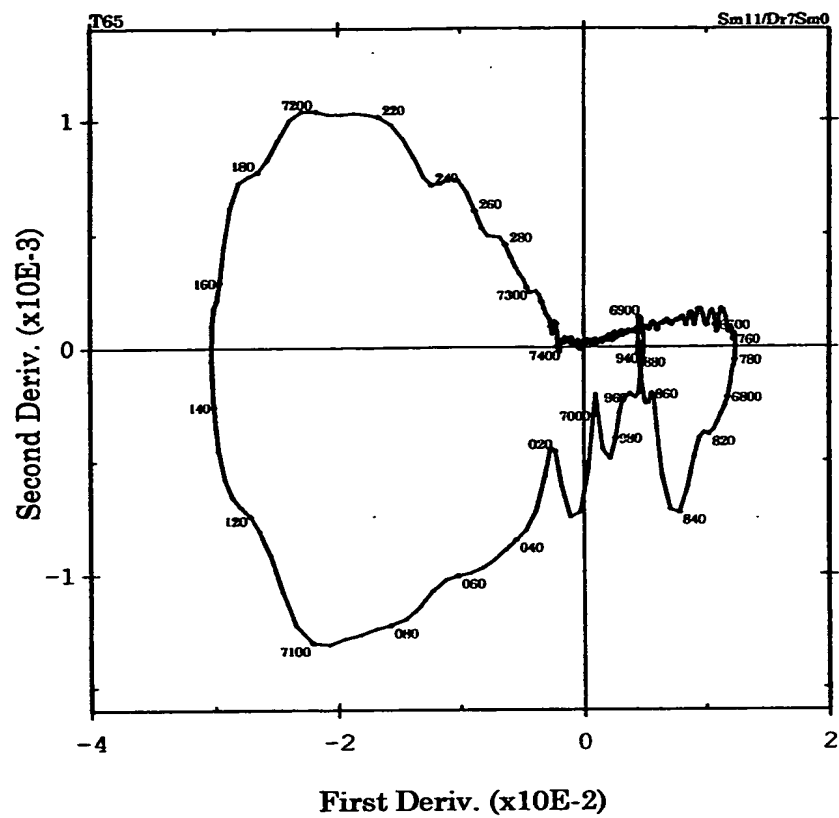
全成分プロット 推定した成分バンド (1) ~ (1 0) を示すスペクトルに係る D 1 - D 2 プロット

【書類名】 図面

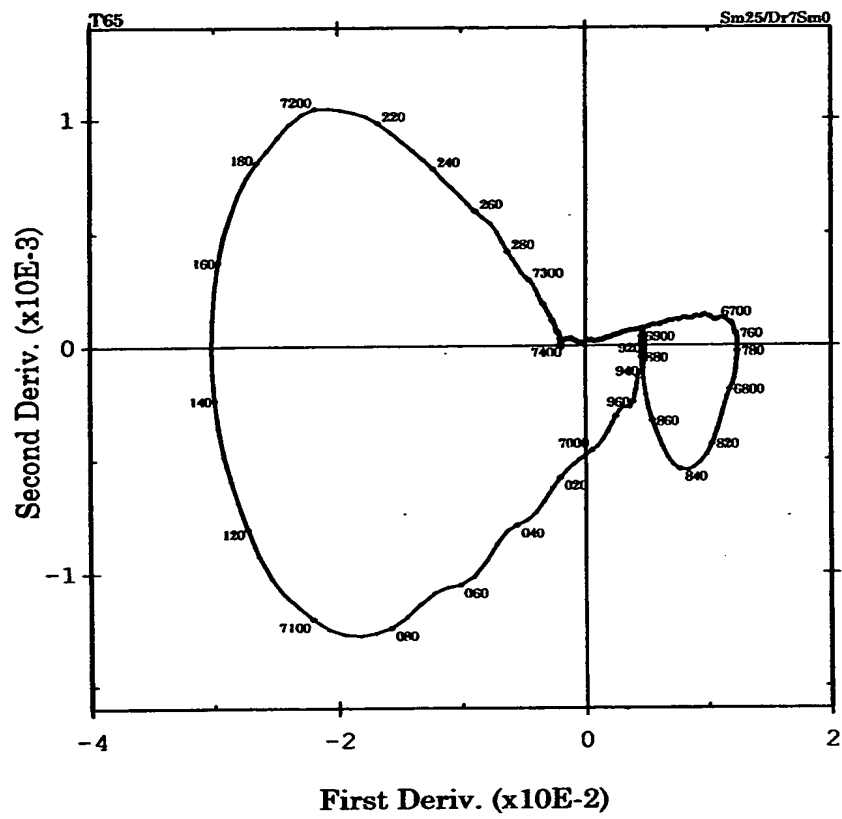
【図 1】



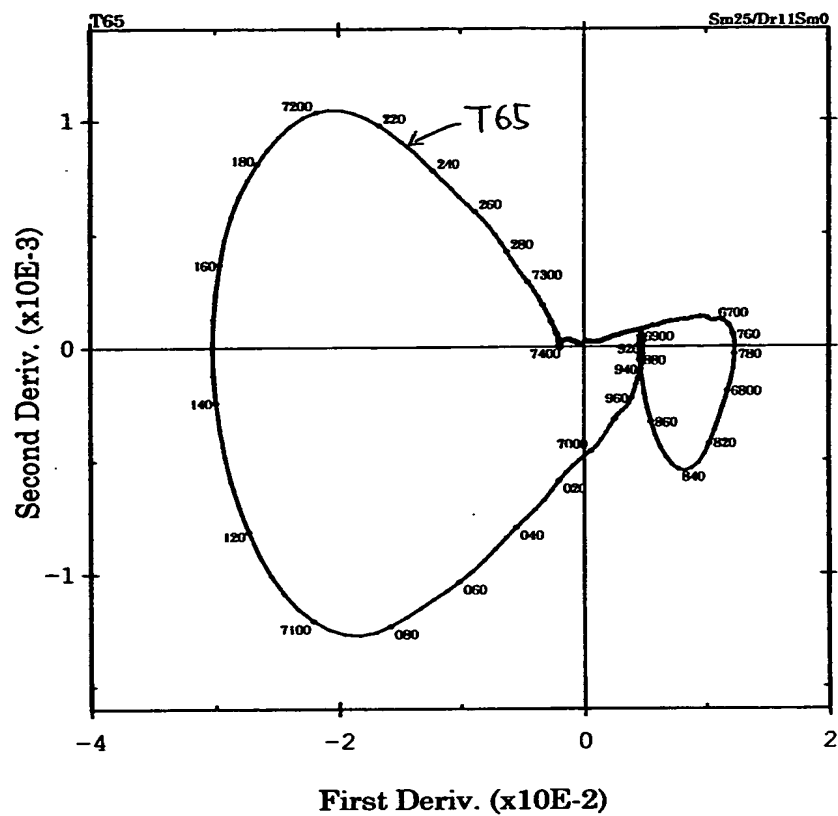
【図 2】



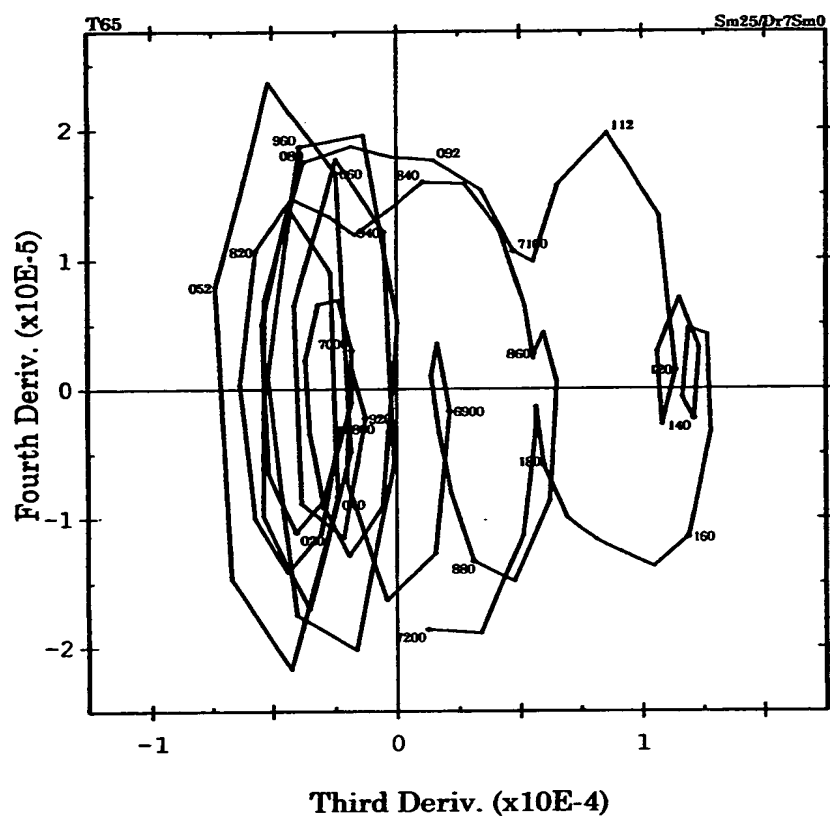
【図 3】



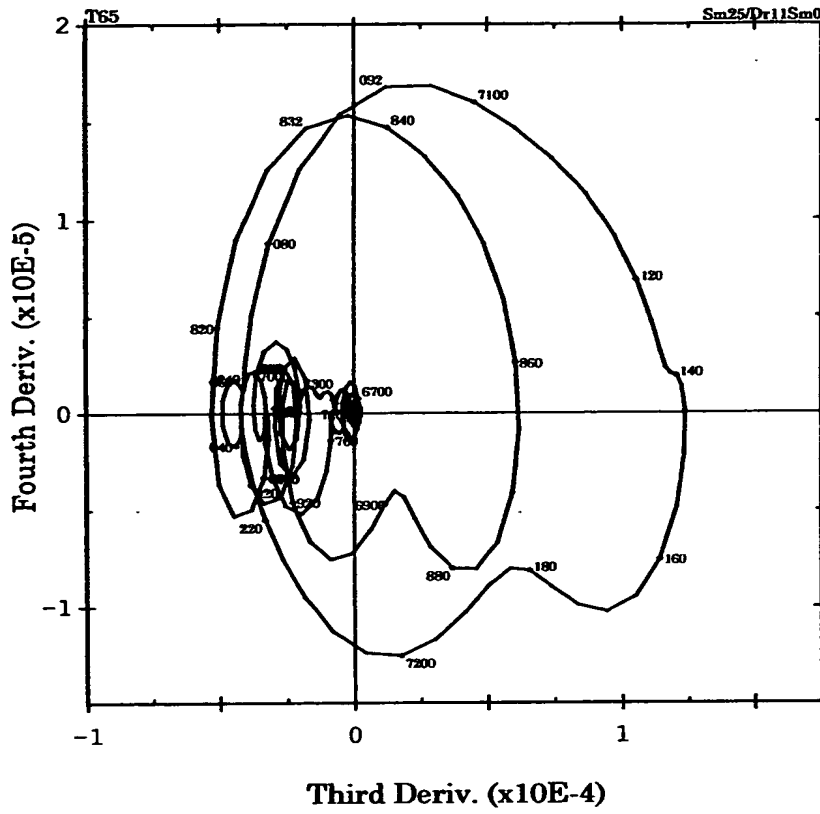
【図 4】



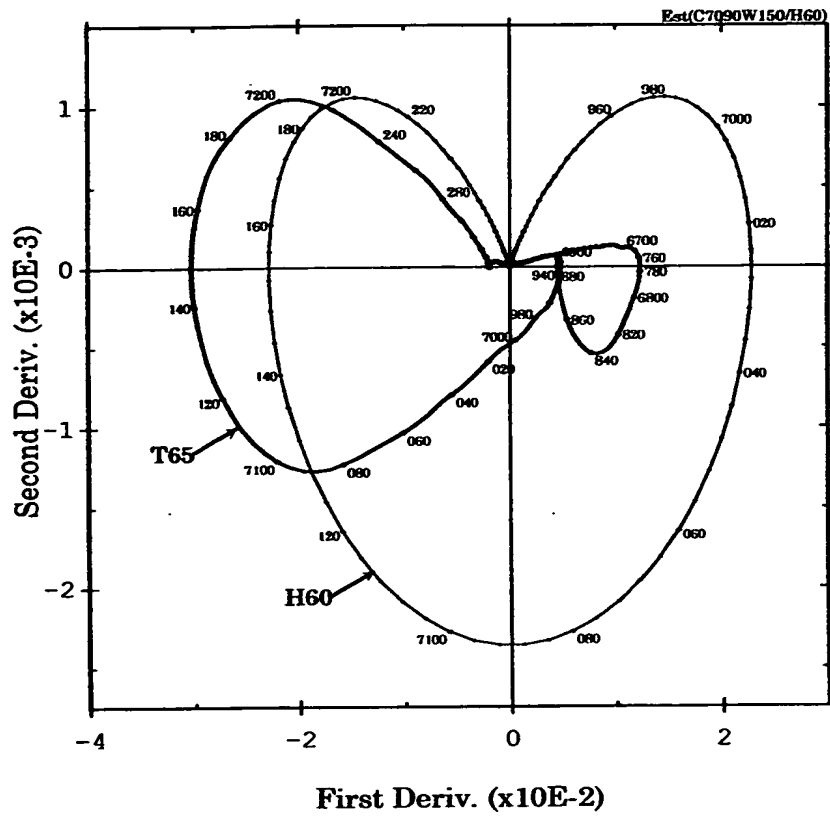
【図 6】



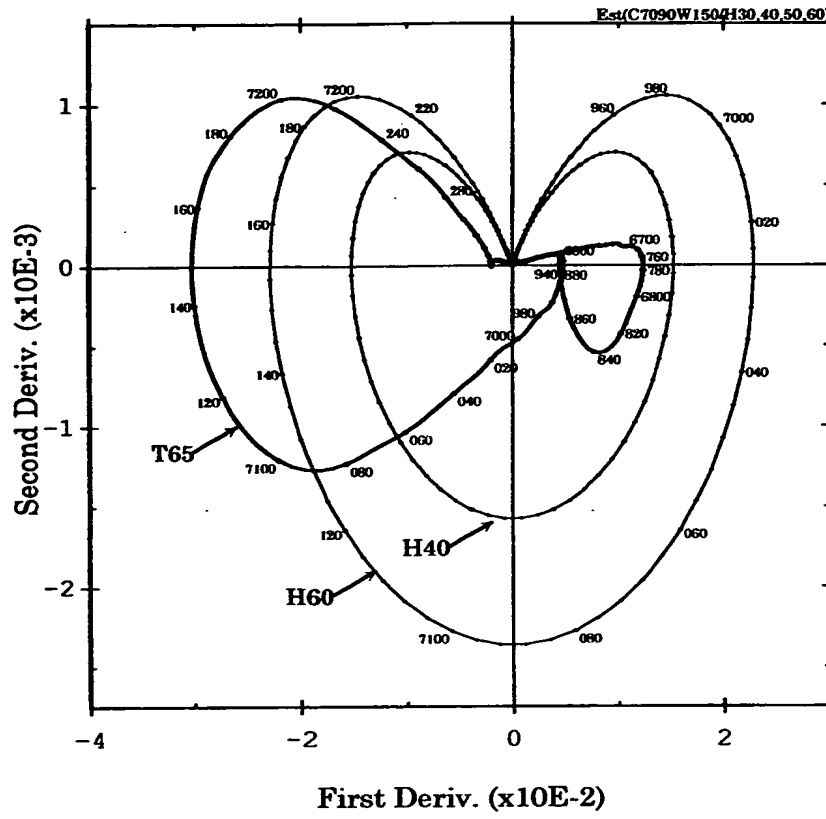
【図 7】



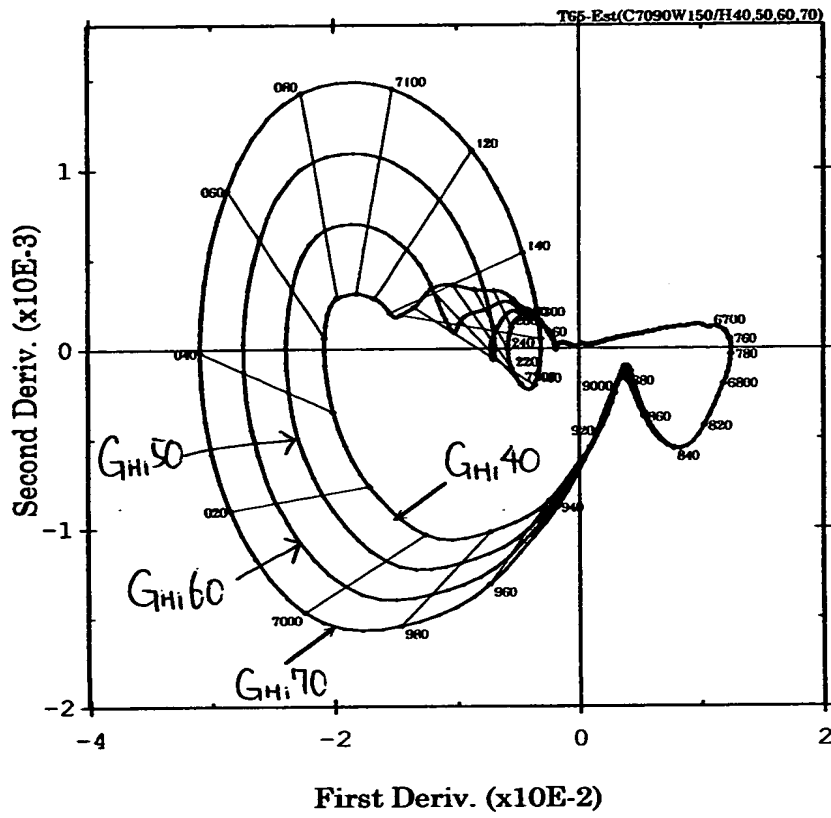
【図 8】



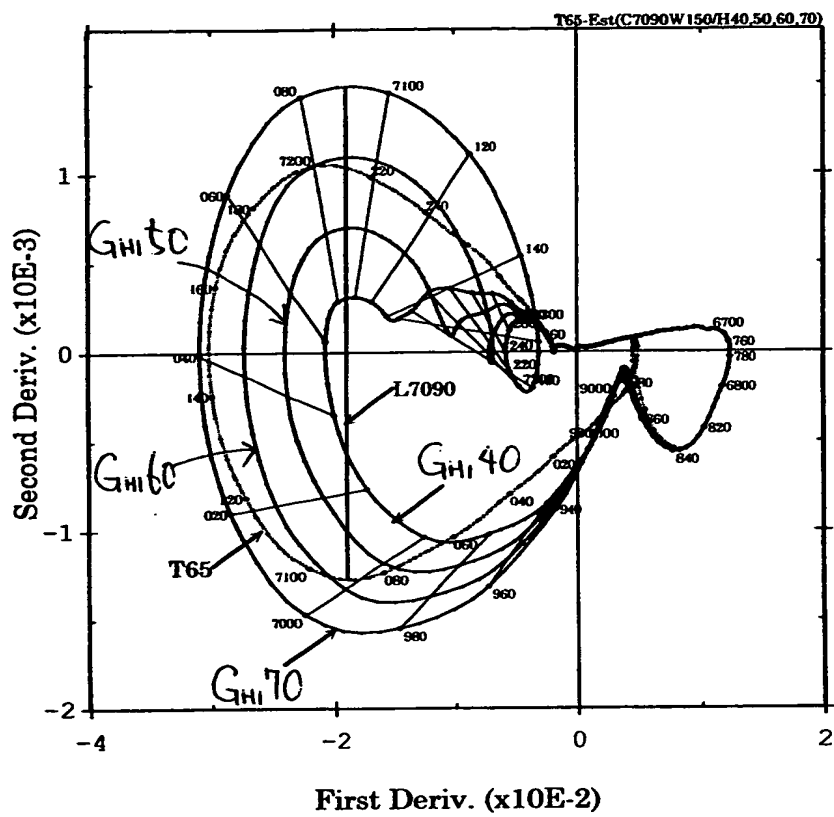
【図 9】



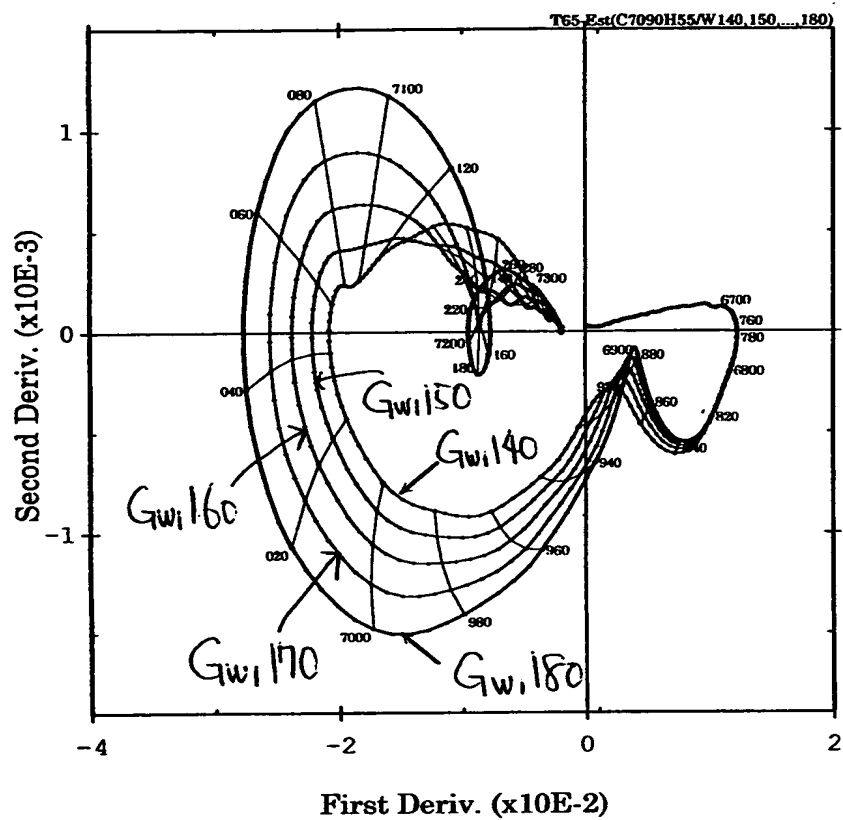
【図 1 0】



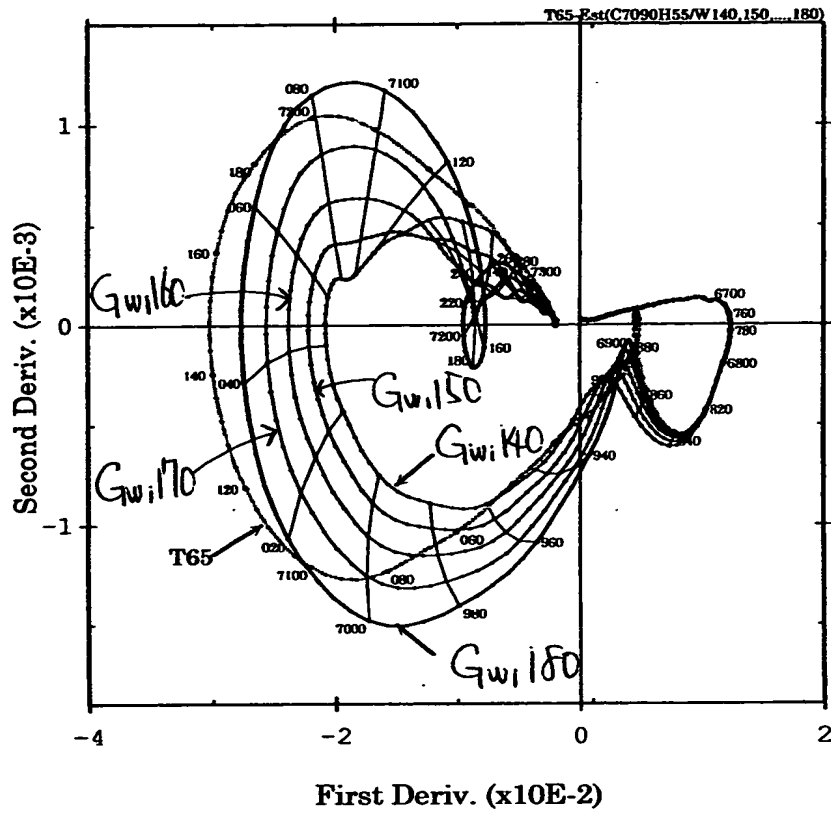
【図 11】



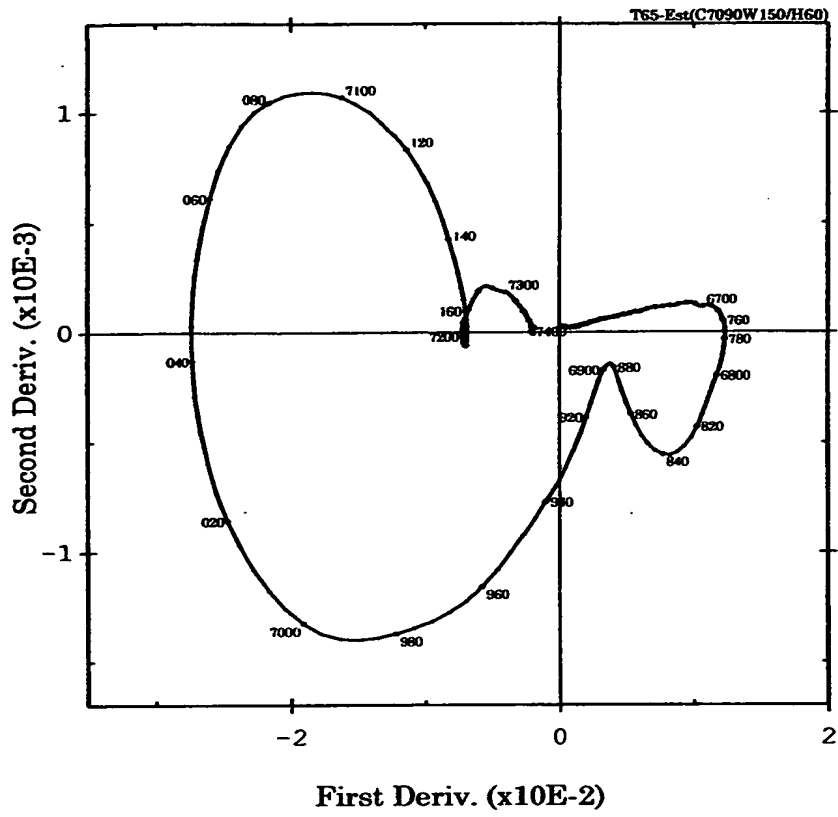
【図 1 2】



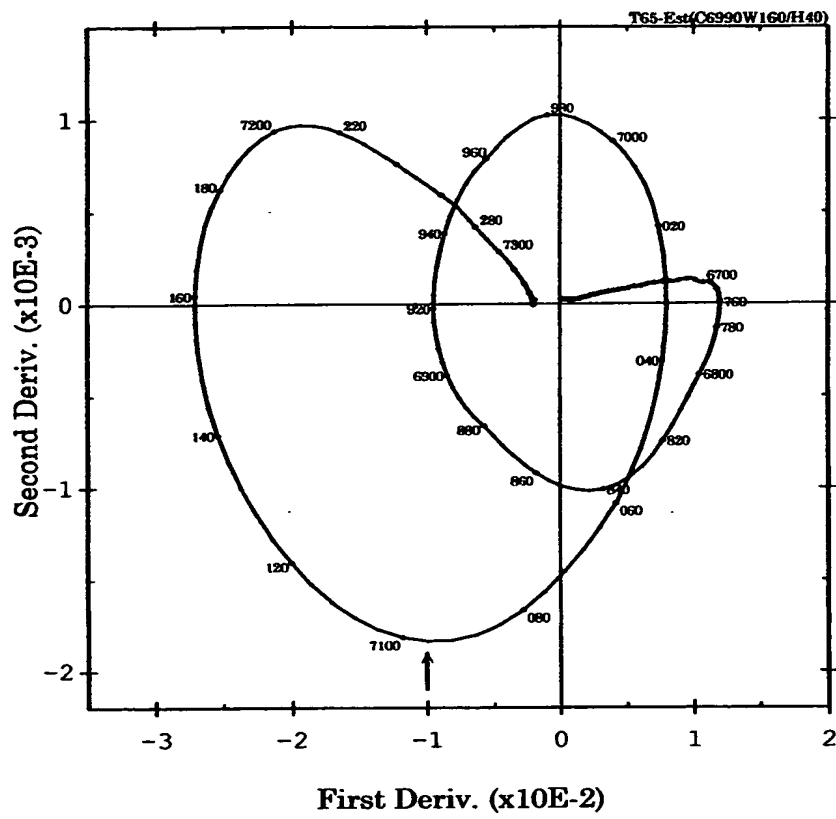
【図 13】



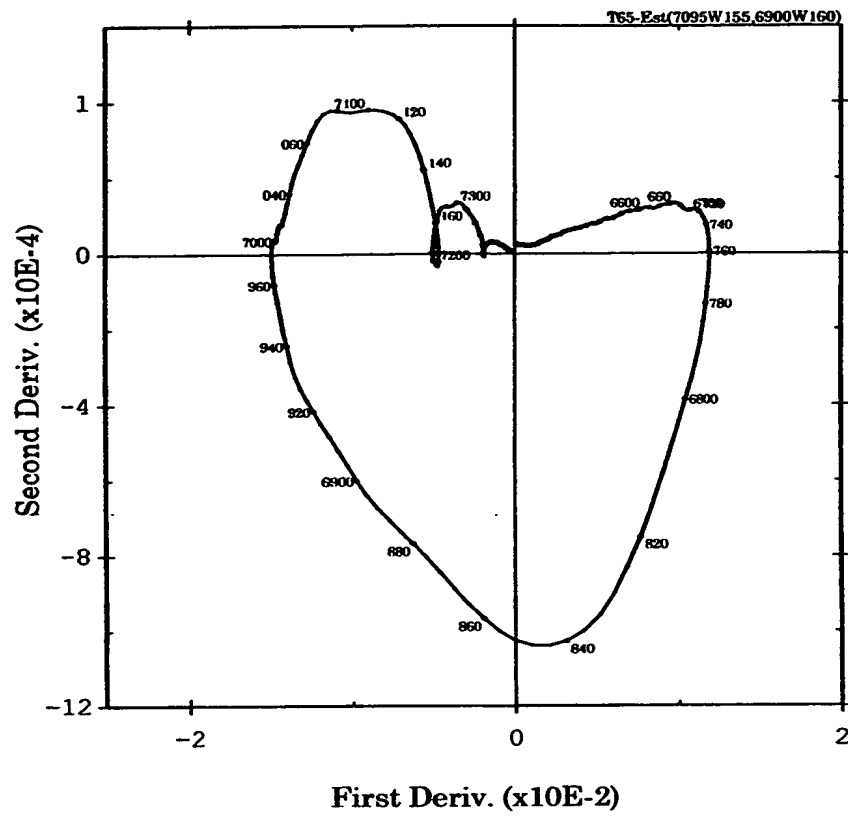
【図14】



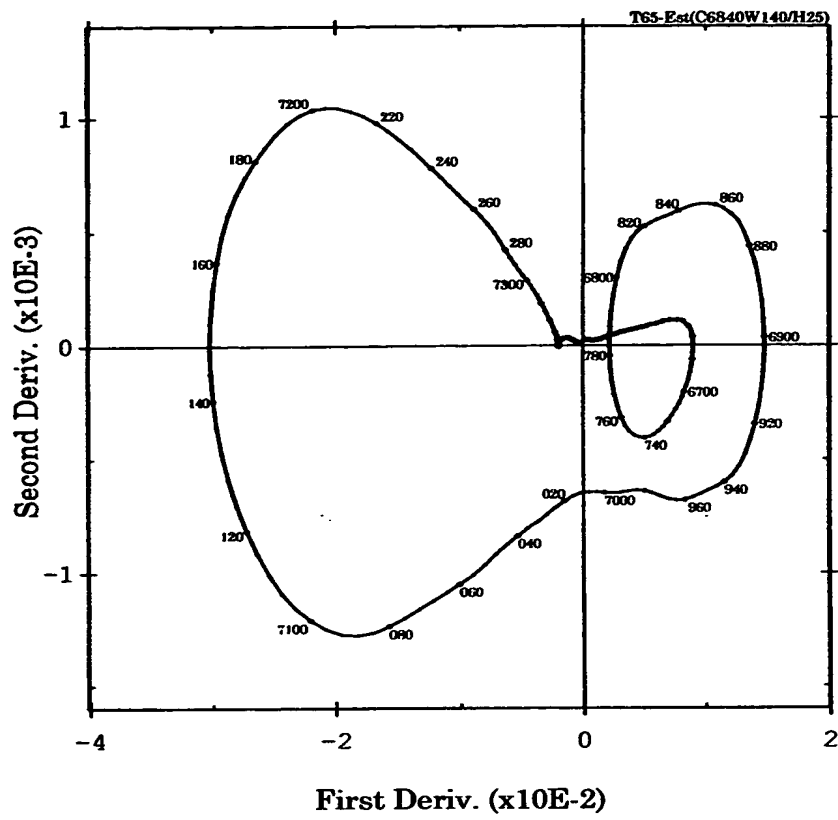
【図 1 5】



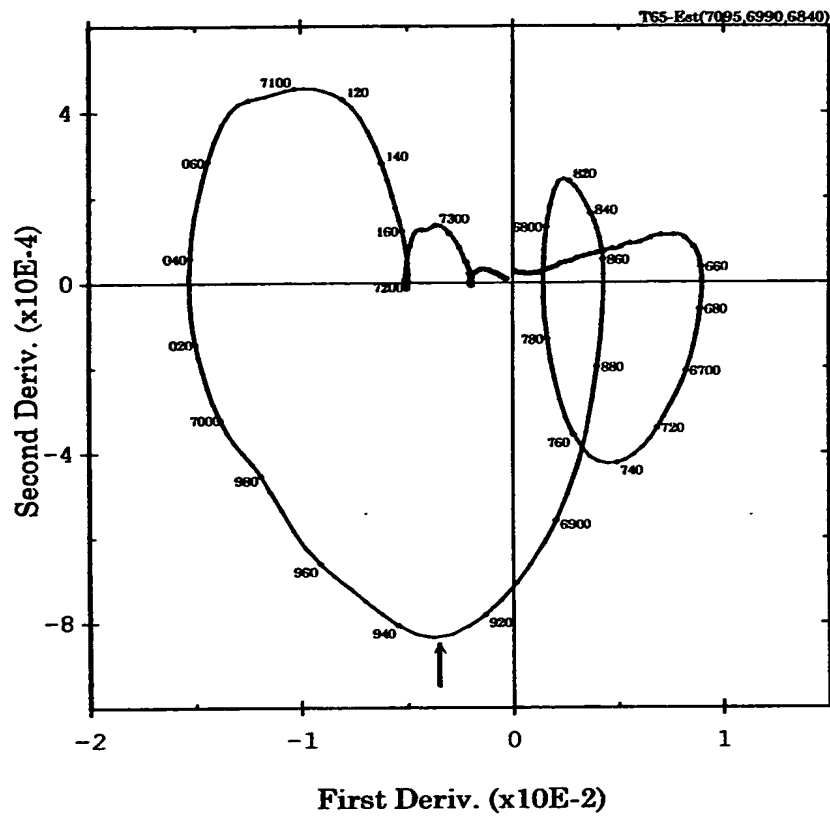
【図 16】



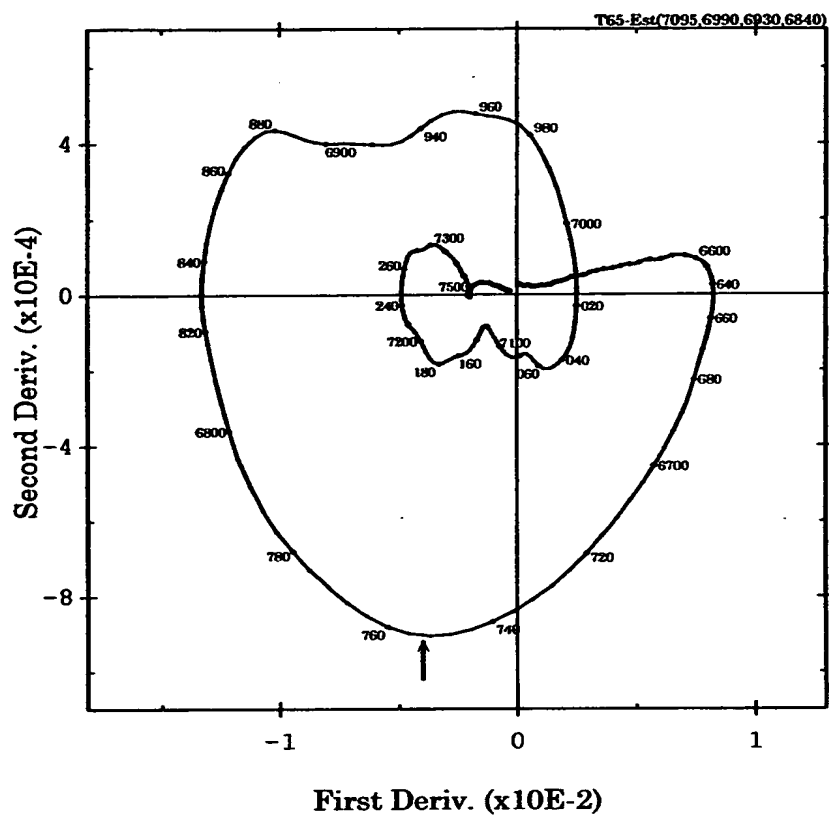
【図 17】



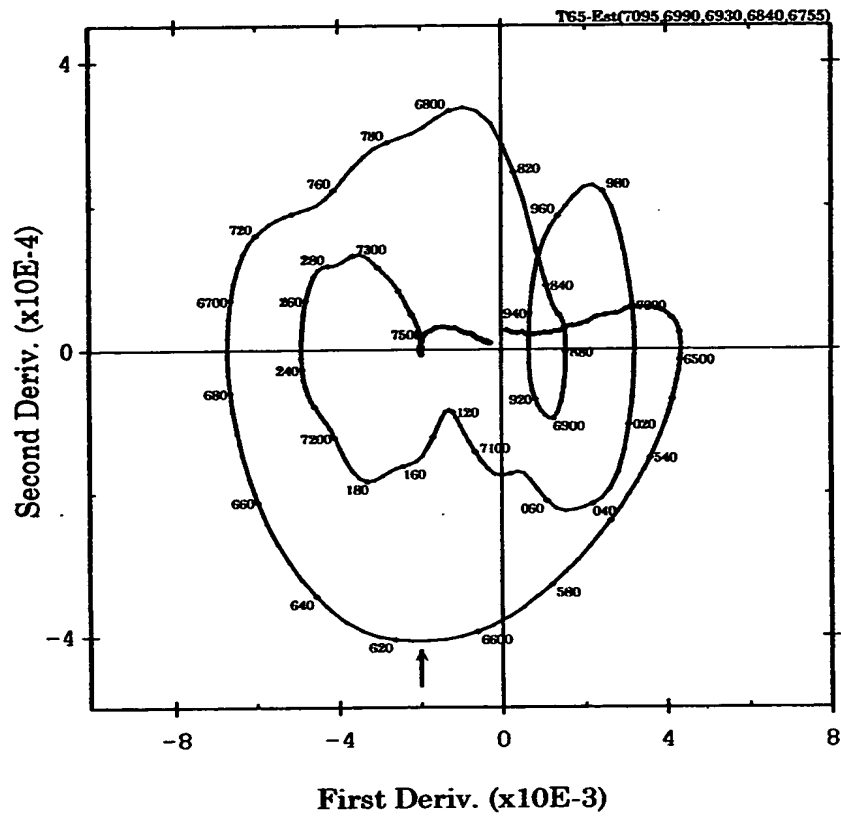
【図 18】

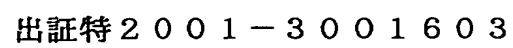


【図 19】

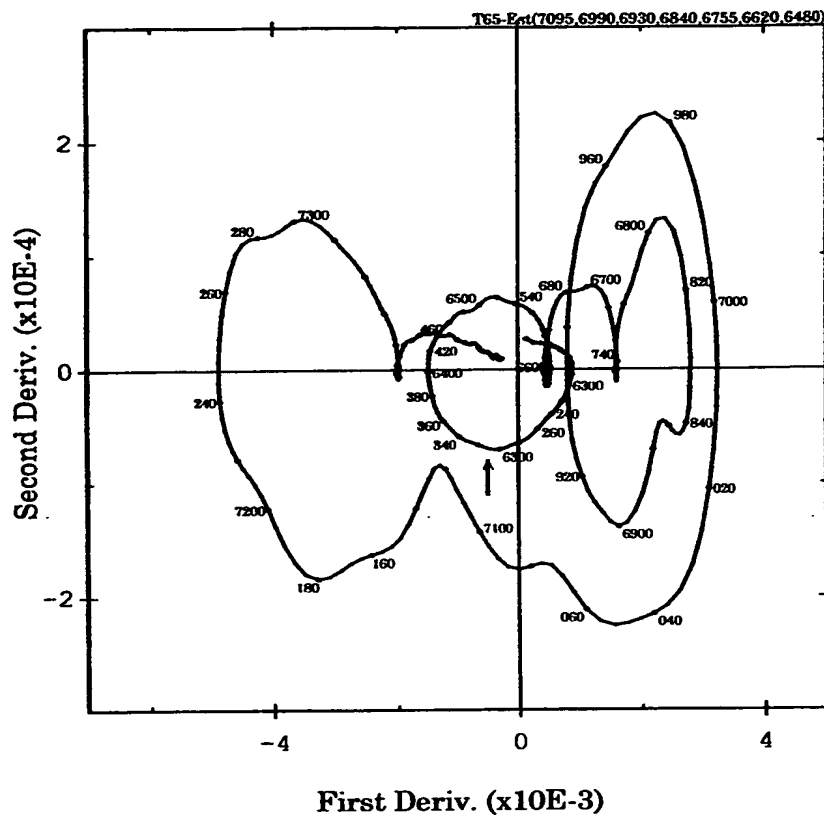


【図 20】

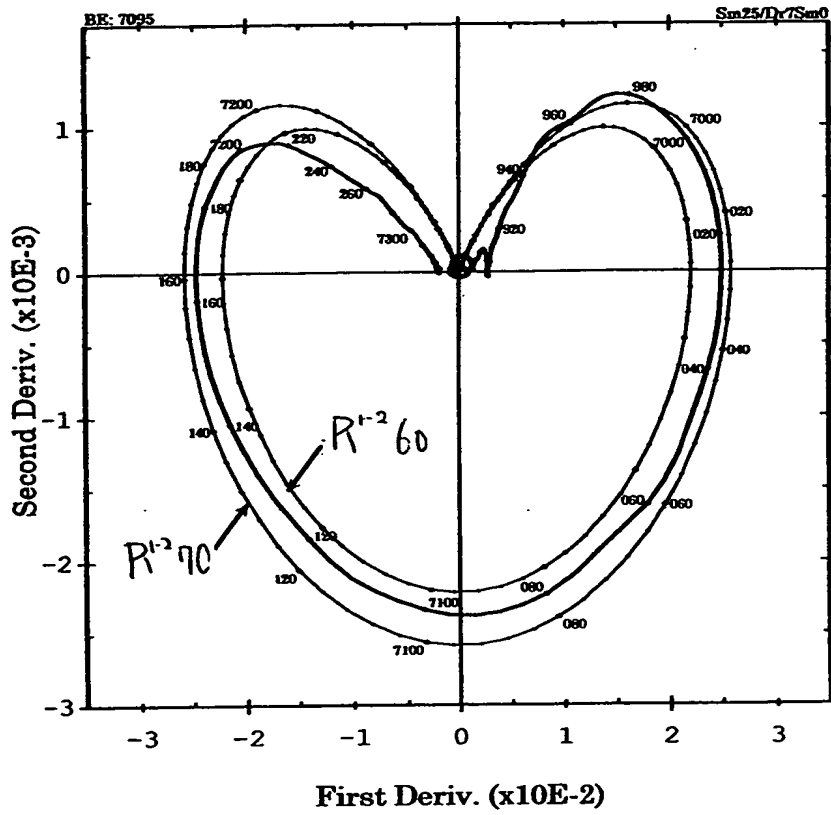




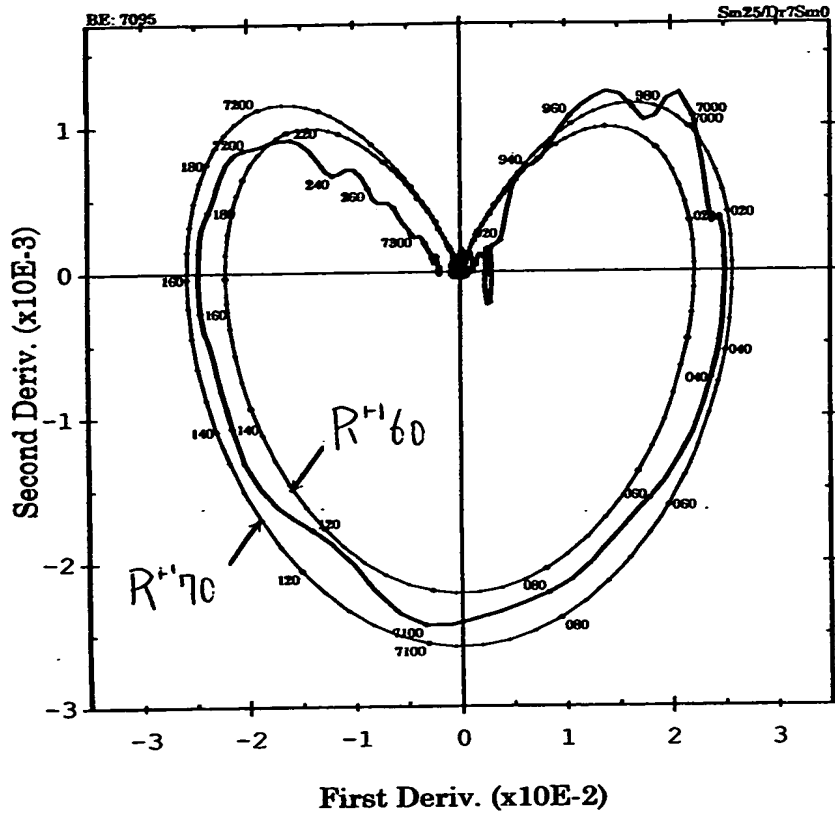
【図 2 2】



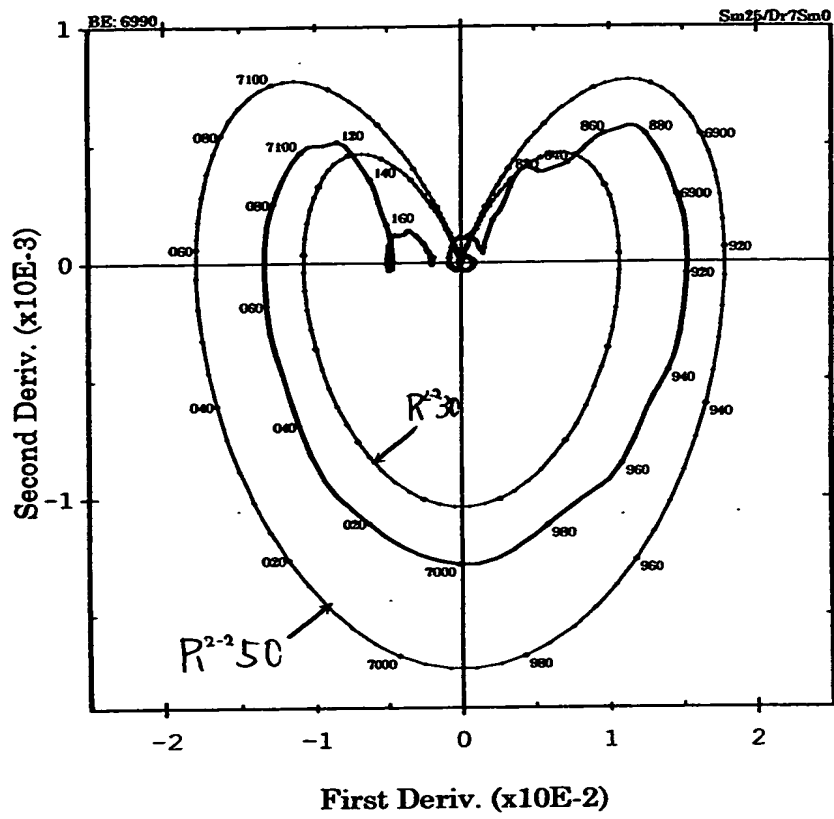
【図 23】



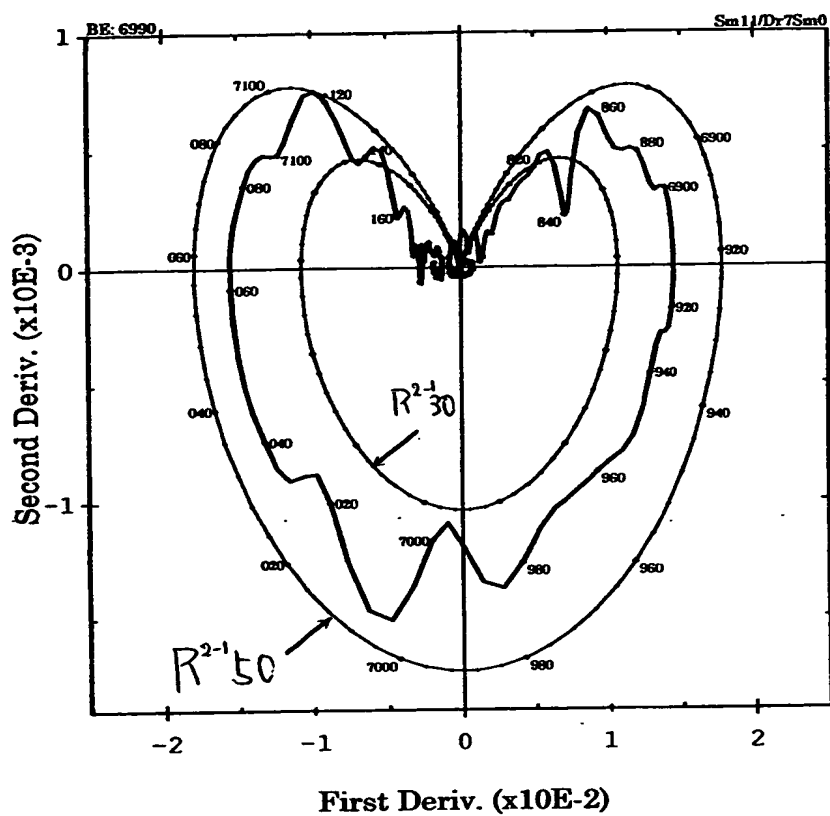
【図24】



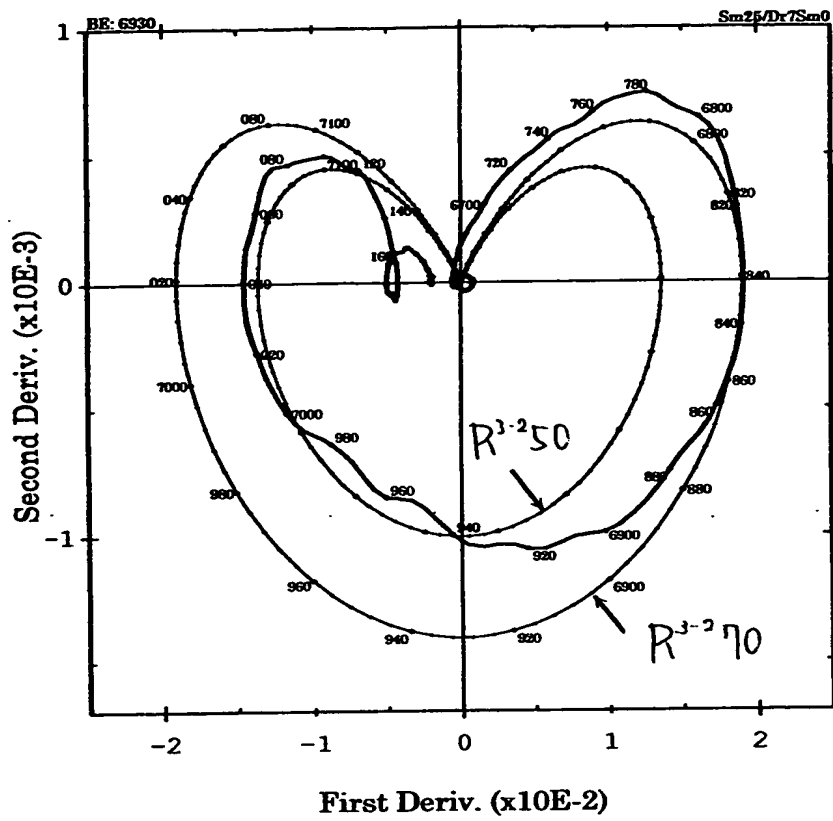
【図 25】



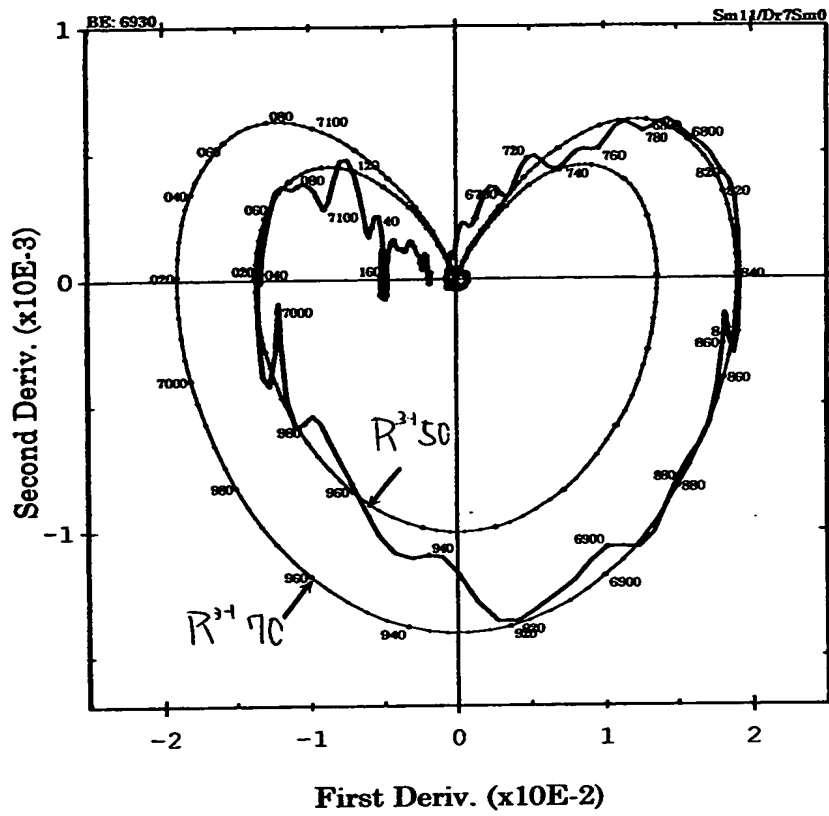
【図 26】



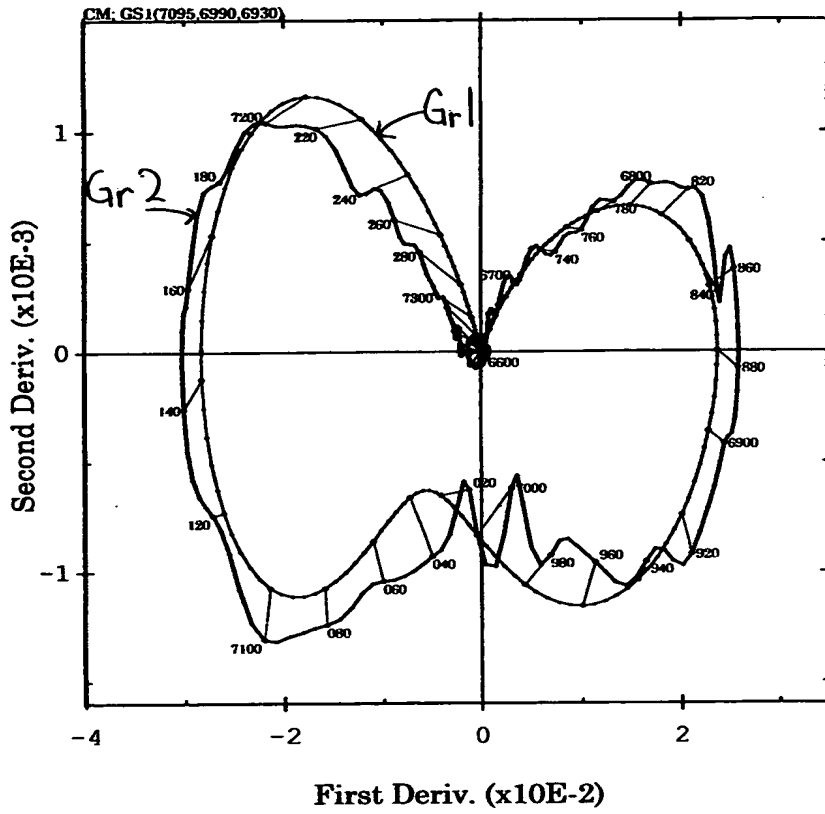
【図 27】



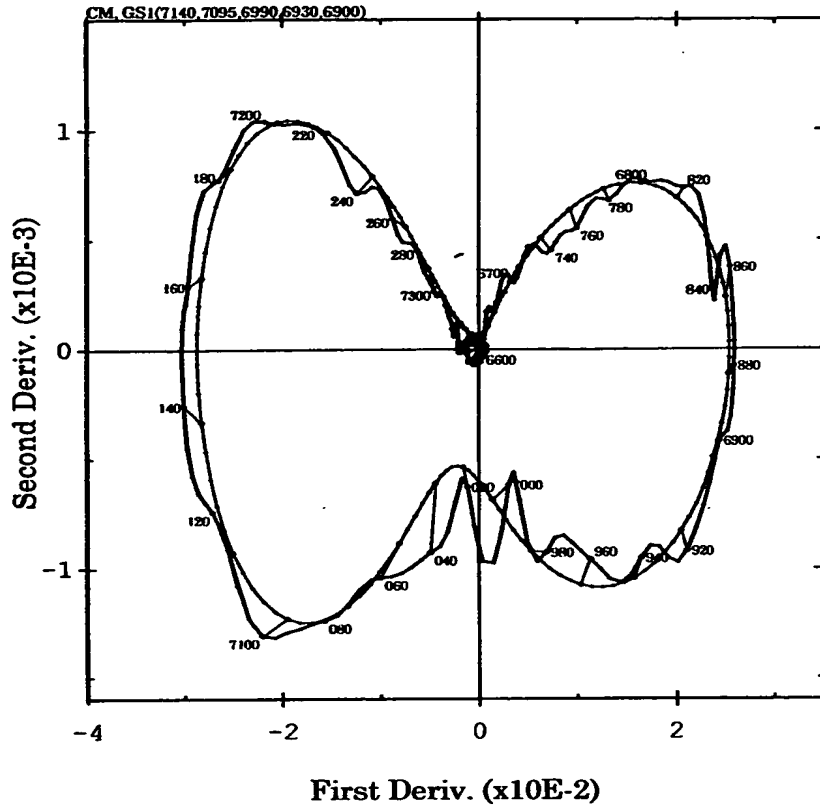
【図28】



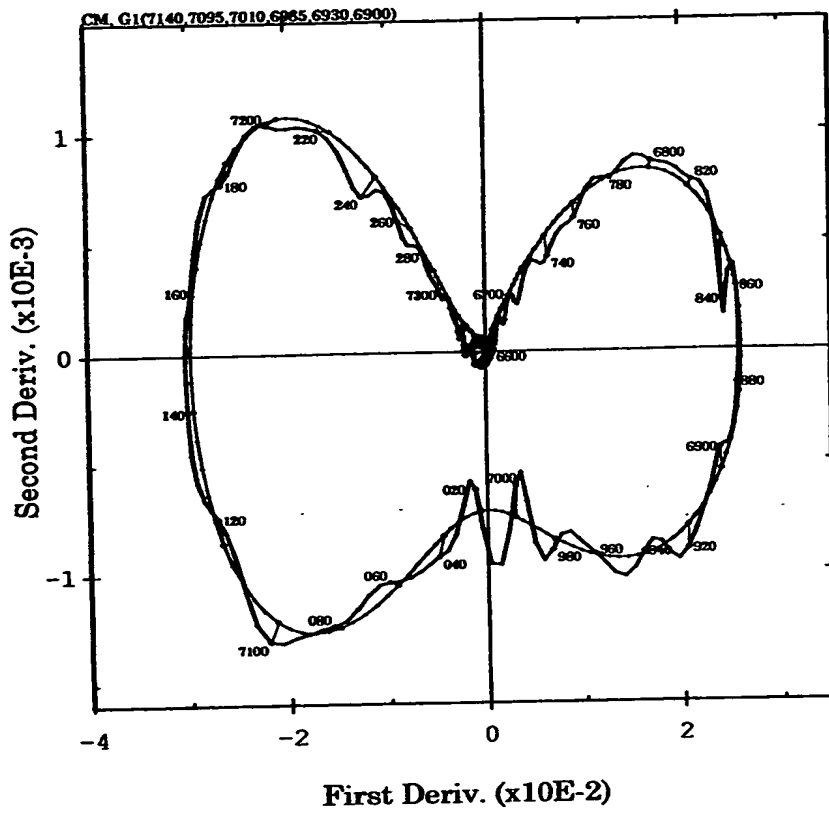
【図 29】



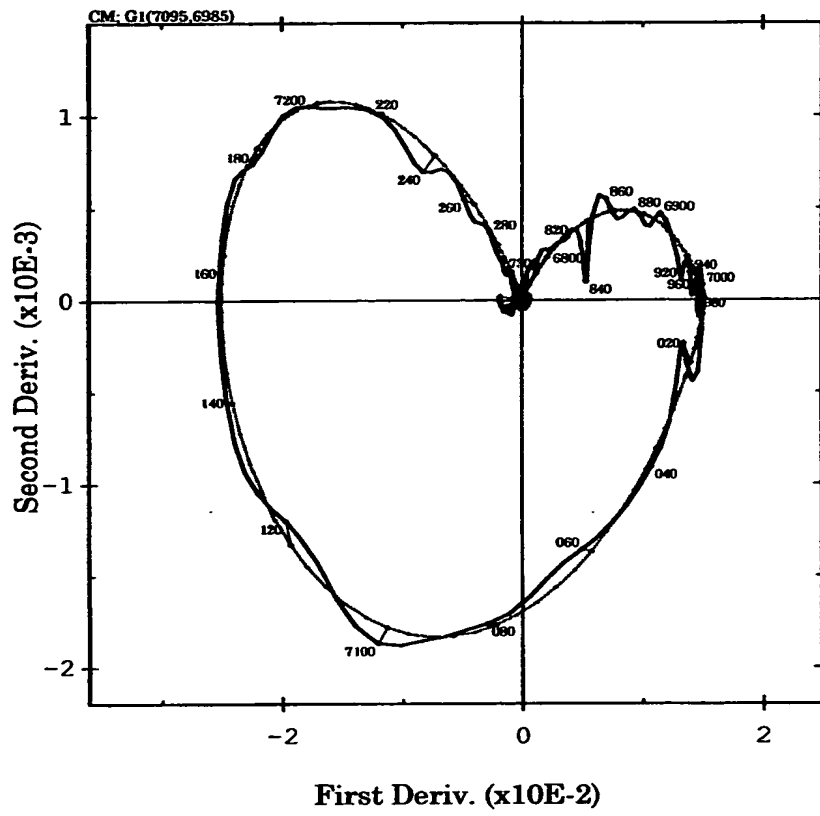
【図 3 0】



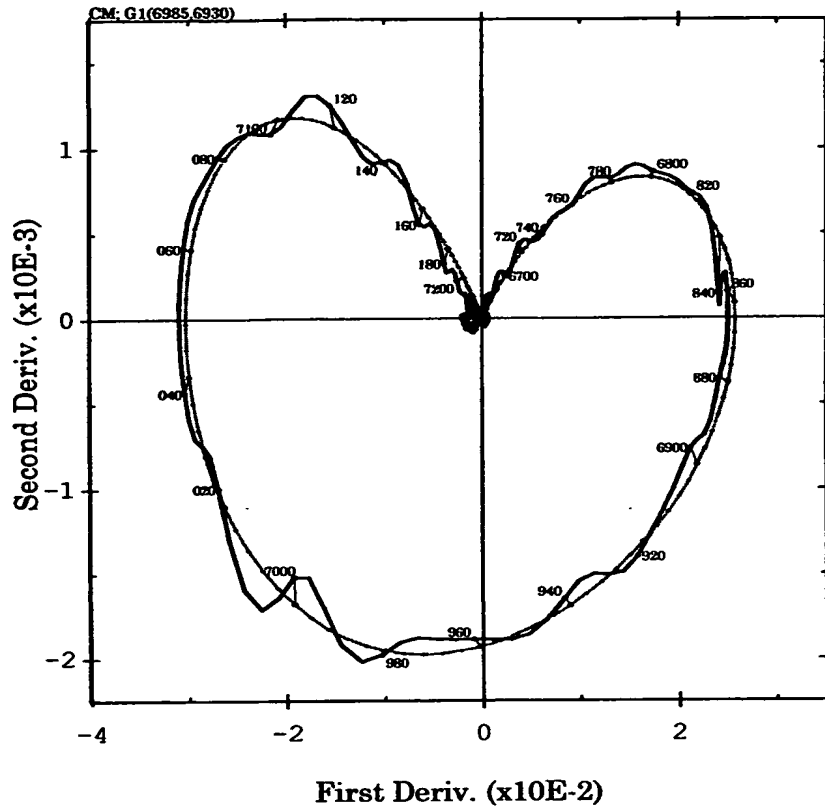
【図 3 2】



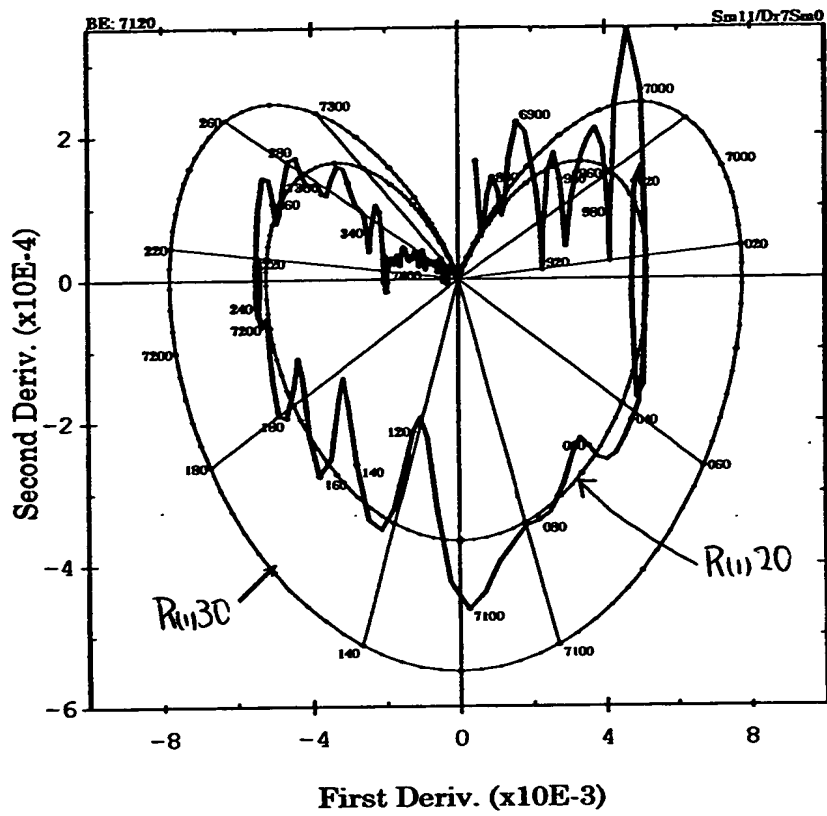
【図 3 3】



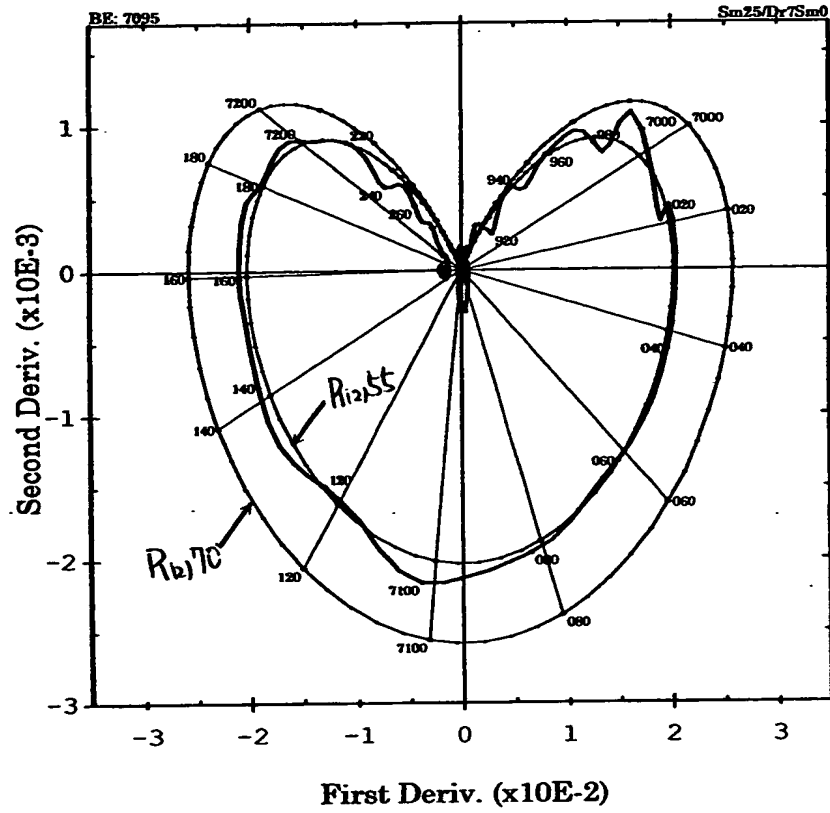
【図 3 4】



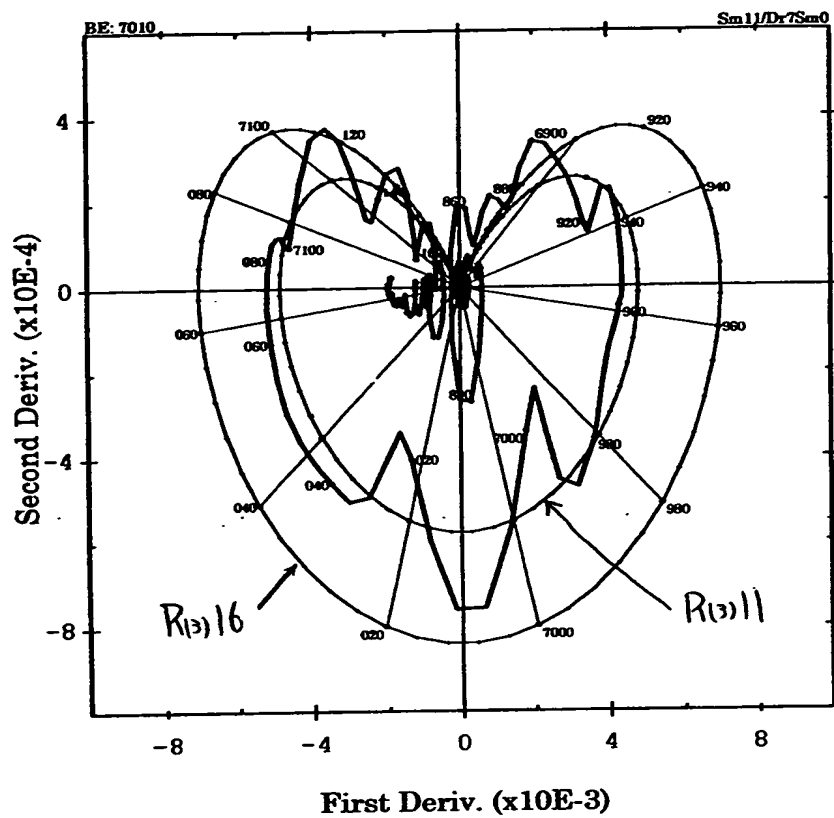
【図 35】



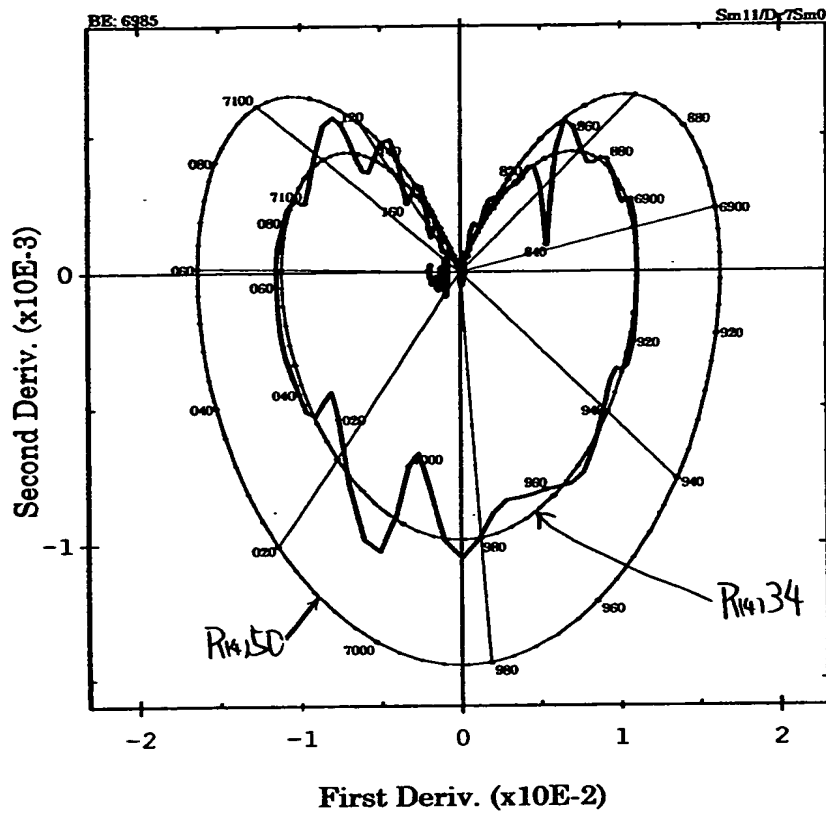
【図 36】



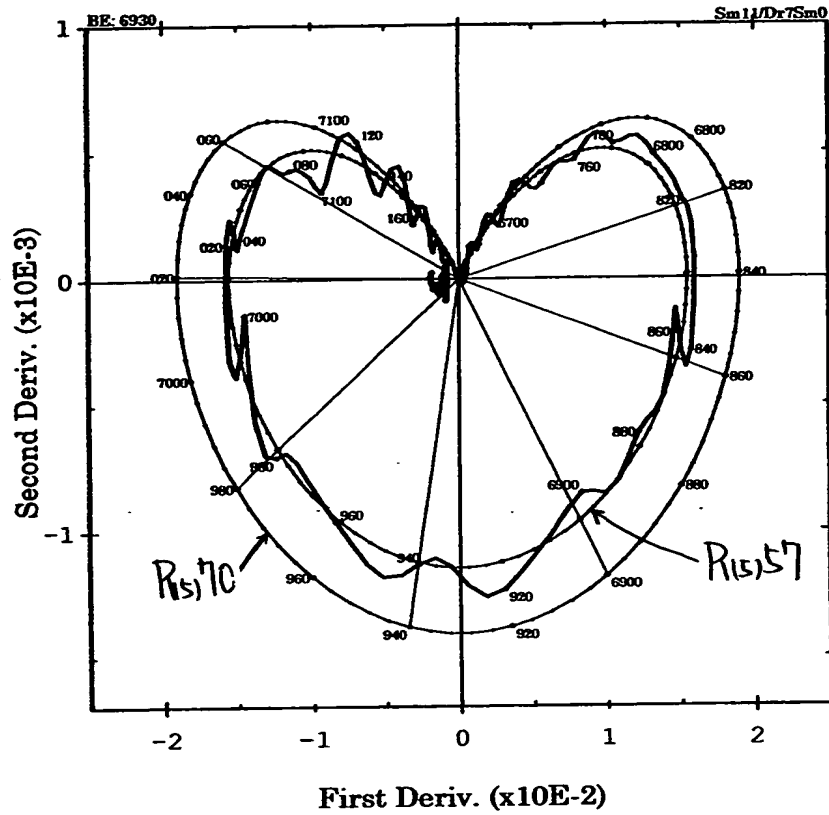
【図 37】



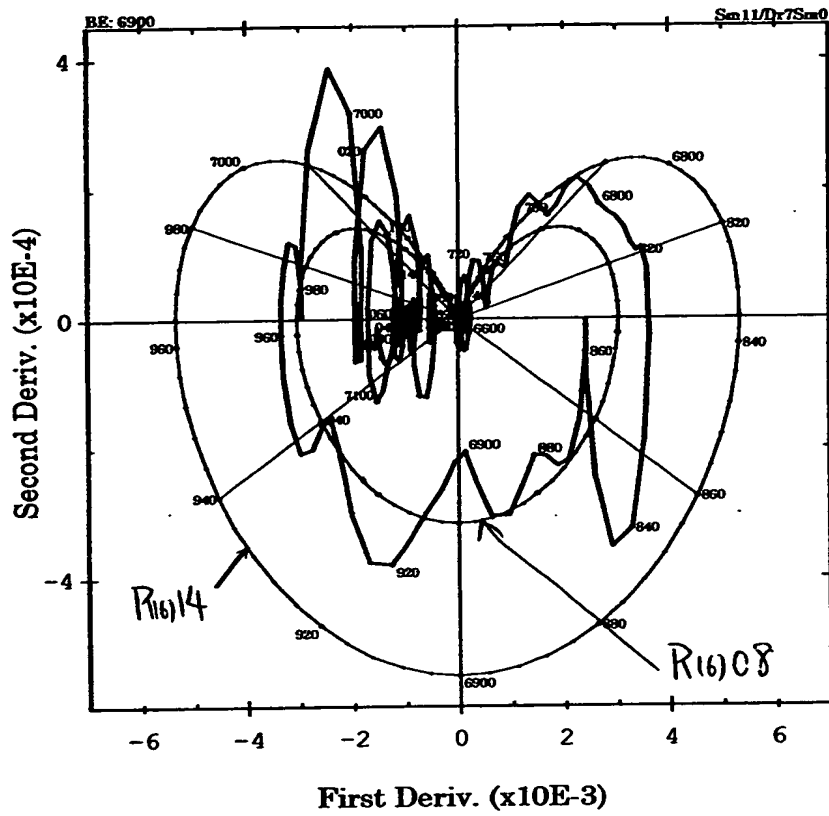
【図 38】



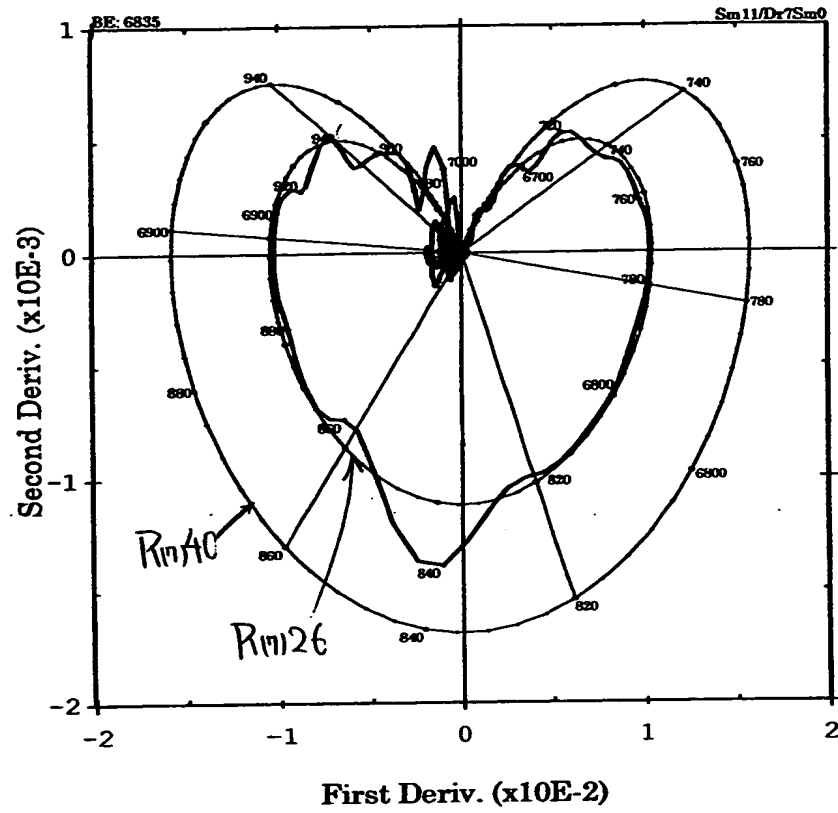
【図 39】



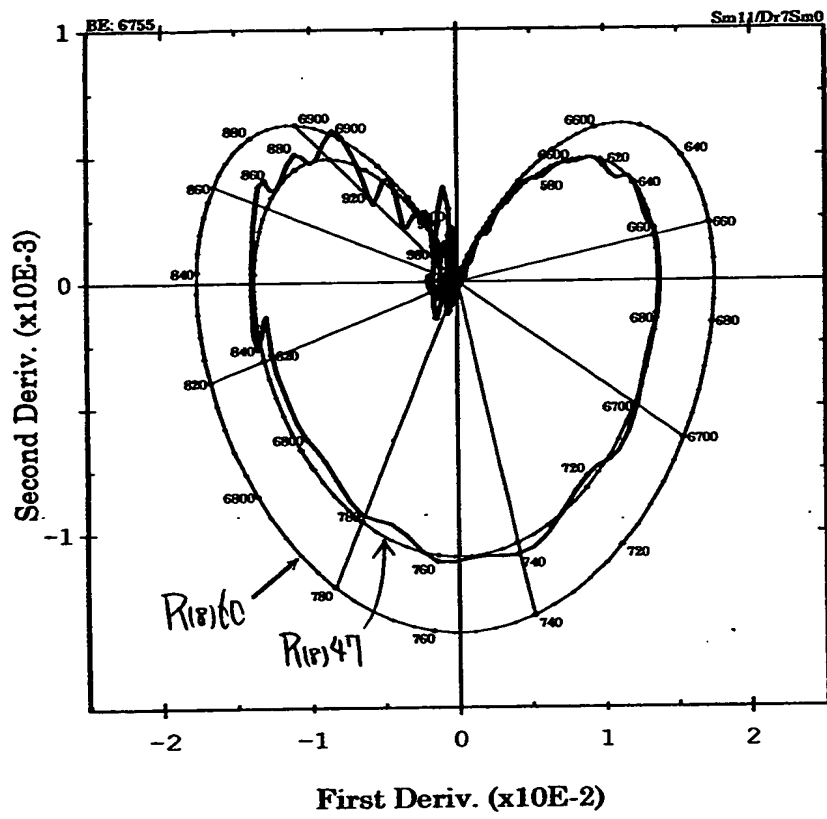
【図 40】



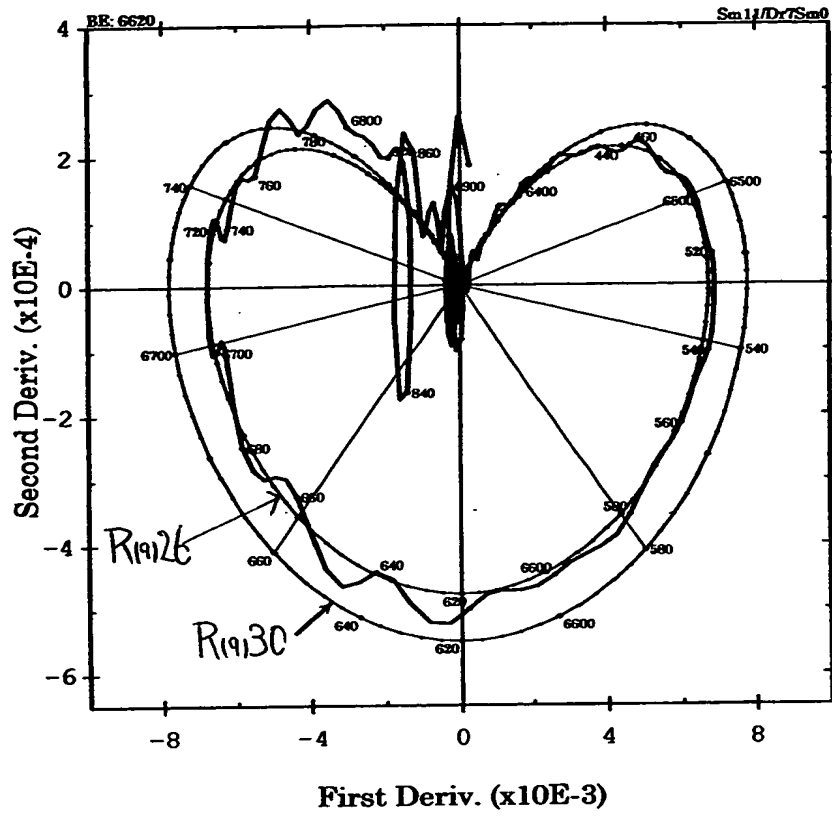
【図 4 1】



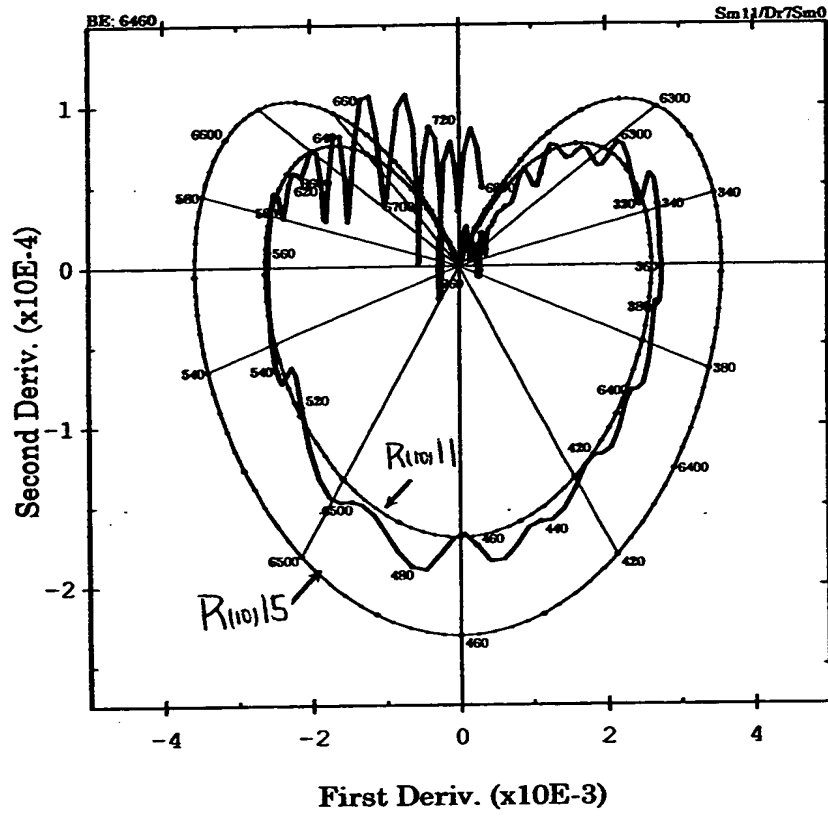
【図 4 2】



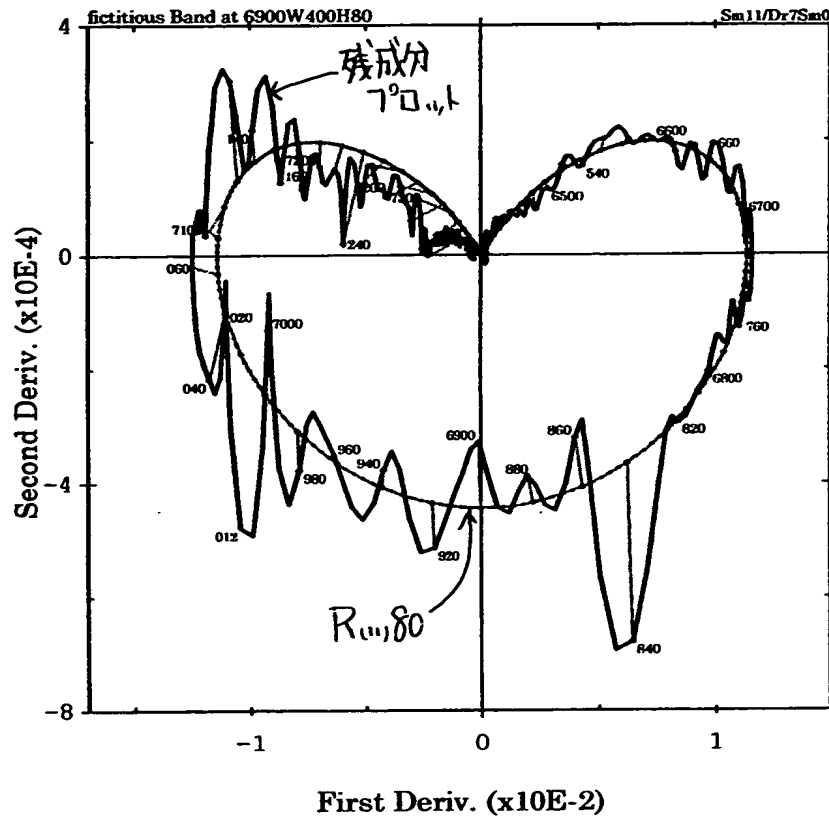
【図 4 3】



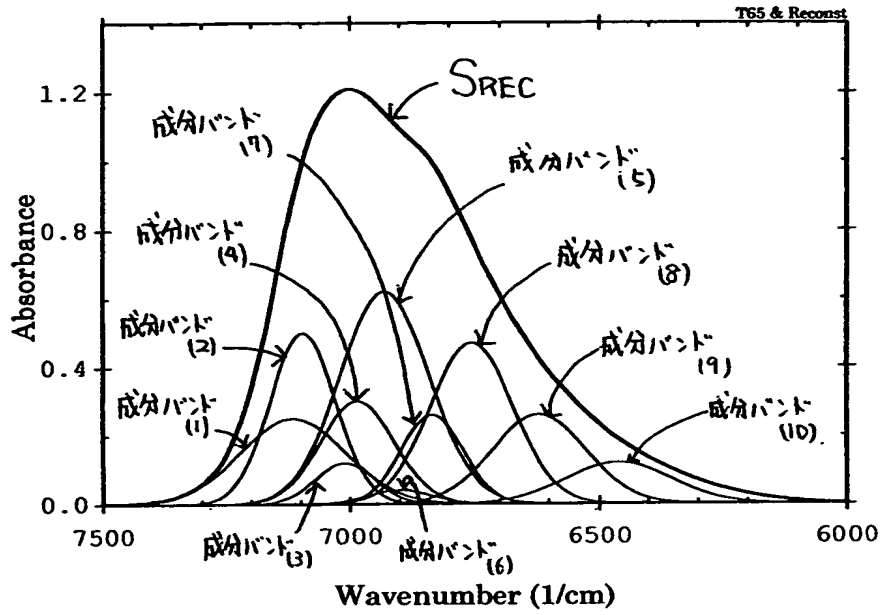
【図 4 4】



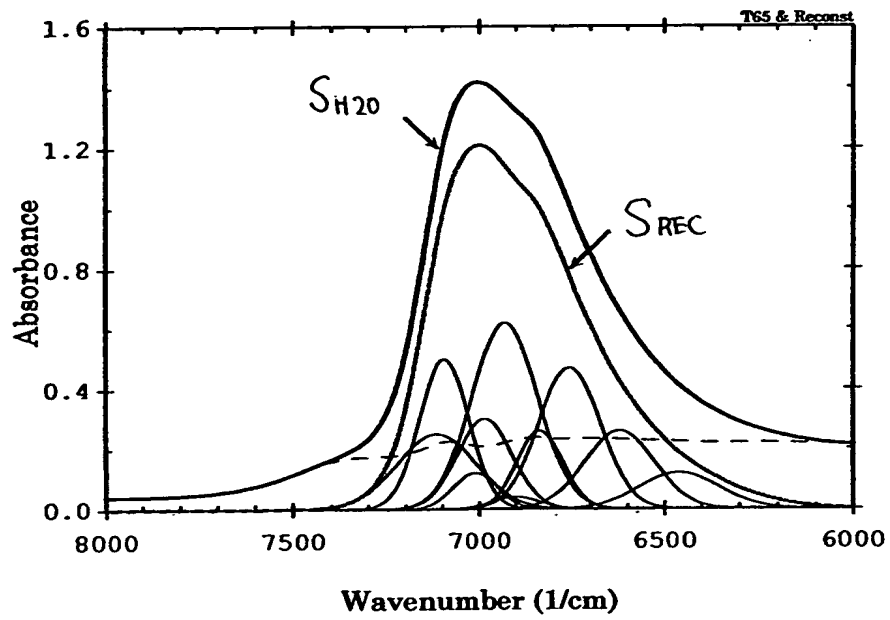
【図 45】



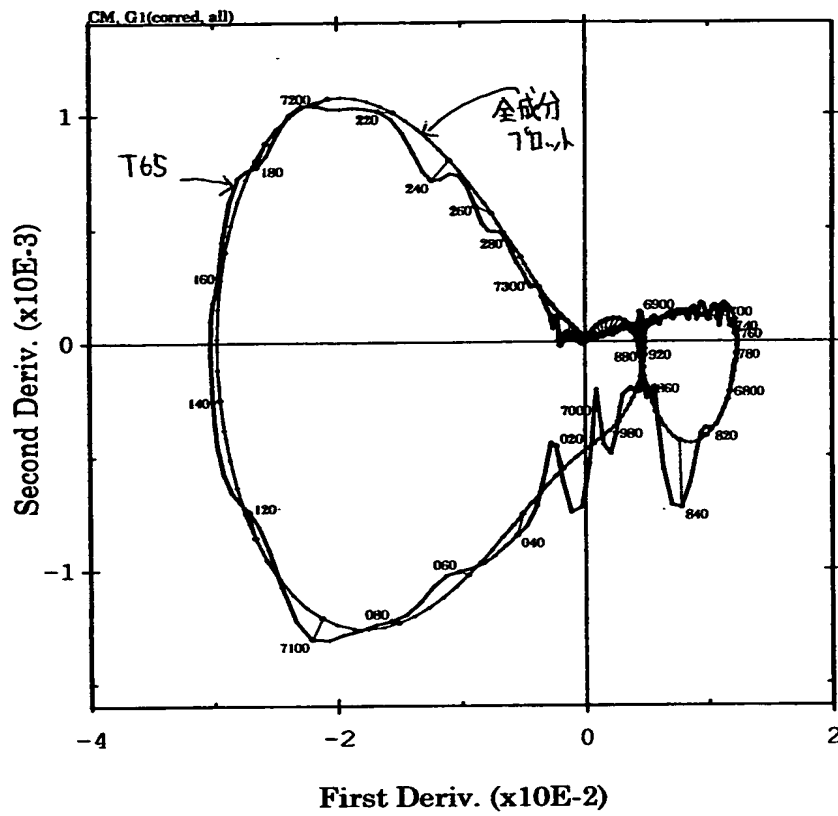
【図 4 6】



【図 4 7】



【図 4 8】



【書類名】 要約書

【要約】

【課題】 複数の成分バンドを含有しているスペクトルプロファイルを有する分析対象物について、その複数の成分バンドを容易に推定することができるスペクトルデータの処理方法。

【解決手段】 所定の分析対象物について、分析器の出力信号強度が、その時間、波数又は波長の関数として表されたスペクトルデータを準備し、 n を0以上の整数とし、 m を n とは異なる0以上の整数とした場合において、上記スペクトルデータについて、そのスペクトルプロファイル上の複数のデータ点についてそれぞれ、上記出力信号強度の、時間、波数又は波長に対する n 次微分値及び m 次微分値を演算し、 $X-Y$ 座標系としての2次元座標面における X 座標が上記 n 次微分値であり、 Y 座標が上記 m 次微分値である点を上記2次元座標面上にプロットして、上記スペクトルデータについての微分スペクトル2次元プロファイルを作成し、上記微分スペクトル2次元プロファイルに基づいて、上記スペクトルデータに関する所定の特徴情報を得る2次元表現によるスペクトルデータの処理方法であって、

上記特徴情報に基づいて、分析対象物のスペクトルプロファイルに含まれている成分バンドのうち、少なくとも1つの成分バンドに関するバンドパラメータを推定して、少なくとも1つの成分バンドを推定し、

分析対象物のスペクトルプロファイル又は微分スペクトル2次元プロファイルから、すでに推定された特定の1つ又は複数の成分バンドのプロファイル又は微分スペクトル2次元プロファイルを除くことで特定の成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイルを得て、この特定の成分バンド除去微分スペクトル2次元プロファイルに基づいて所定の特徴情報を得て、当該特徴情報に基づいて他の成分バンドに関するバンドパラメータを推定して、他の成分バンドを少なくとも1つ推定することを繰り返して順次成分バンドを推定することにより、

分析対象物のスペクトルプロファイルを構成する成分バンドを推定する2次元表現によるスペクトルデータの処理方法。

【選択図】 なし

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号 [500131963]

1. 変更年月日 2000年 3月24日

[変更理由] 新規登録

住 所 大阪府豊中市新千里東町2丁目7番C25-103号

氏 名 小足 克衛